

## Uma Análise Sobre as Diferentes Formas de Representação de Orbitais

### *On The Analysis of Different Orbital Representations*

João Guilherme S. Monteiro,<sup>a</sup> Arthur C. P. G. Ventura,<sup>a</sup> Luciano T. Costa<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal Fluminense,  
Campus Valonguinho, Instituto de  
Química, Departamento de Físico-  
Química, Niterói-RJ, CEP 24020-141,  
Brasil

\*E-mail: [ltcosta@id.uff.br](mailto:ltcosta@id.uff.br)

Submissão: 31 de Agosto de 2025

Aceite: 10 de Dezembro de 2025

Publicado online: 19 de Dezembro de 2025

The rapid growth of computational chemistry has broadened the use of molecular orbitals in teaching, research, and technology. In most chemistry textbooks, molecular geometry, stability, and reactivity are explained in terms of the size and shape of valence orbitals. Students are often introduced to these ideas before formally studying quantum mechanics, which can lead to conceptual difficulties. This paper addresses some challenges arising from how orbitals are presented in introductory courses. A major source of misunderstanding may come from how orbital diagrams and figures are interpreted in teaching materials. To help clarify these issues, we discuss the meaning of radial probability distribution plots and present two different visual representations of the spherical harmonics—one widely used in chemistry education and another less familiar to students. We also compare standard methods of visualizing atomic orbitals, including contour maps, surface plots, isosurfaces, and density plots, highlighting their strengths and limitations for the use in the classroom. Finally, these tools are applied to the case study of bond dissociation in the molecular ion  $H_2^+$ , showing how alternative representations can support a deeper and more accurate understanding of orbitals in chemical education

**Keywords:** Atomic orbitals; spherical harmonics; chemical bond; isosurface; density plot.

### 1. Introdução

Há exatos 100 anos nascia a mecânica quântica moderna pelas contribuições de Heisenberg<sup>1</sup> e Schrödinger,<sup>2</sup> os quais certamente não imaginavam o quanto suas teorias impactariam a ciência e tecnologia. Alguns dos conceitos dessa teoria e suas interpretações viriam a ser debatidos por décadas. O orbital, conceito desenvolvido alguns anos mais tarde, desempenha papel fundamental na química e é o tema central deste trabalho.

Em química, a explicação de diversos fenômenos relacionados à estabilidade e à reatividade de moléculas é feita com base nos princípios da mecânica quântica. A química quântica (terminologia usualmente empregada para designar a aplicação da mecânica quântica em química) é uma subárea da físico-química e seu estudo possui uma série de pré-requisitos, principalmente disciplinas de cálculo e de álgebra linear. Os alunos, mesmo em disciplinas introdutórias de química geral, inorgânica e orgânica, são apresentados a definições de funções de onda, níveis de energia, princípio da incerteza de Heisenberg, entre outros. Tais conceitos constituem o arcabouço teórico empregado por químicos para explicar as diferentes transformações entre compostos. A linguagem derivada da química quântica é usada em substituição a uma argumentação fenomenológica (macroscópica) baseada na termodinâmica.<sup>3</sup> Isso se deve, em parte, à forma microscópica como a química enxerga os fenômenos à sua volta, procurando compreender o comportamento das moléculas e sua interação com o ambiente.

A evolução das metodologias da química teórico-computacional permitiu explicar diversos processos químicos em nível molecular. A capacidade de calcular propriedades moleculares sem recorrer a nenhuma informação empírica, como nos métodos denominados de *ab initio*, tem feito parte cada vez mais do cotidiano da química.<sup>4</sup> Essa evolução faz com que certos autores defendam o uso de modelos qualitativos e simples para explicar os fenômenos, em contraste com a formulação computacional, de maior complexidade. Roald Hoffmann discute a diferença entre o entendimento qualitativo *versus* quantitativo acerca de uma determinada propriedade.<sup>5</sup> O rápido desenvolvimento da química computacional permite o cálculo de propriedades com acurácia muitas vezes superior à experimental. Porém, isso não significa que haja, concomitantemente, um entendimento qualitativo do fenômeno. A tentativa de entender qualitativamente os resultados computacionais e experimentais levou ao desenvolvimento de uma linguagem química independente, que pode ser chamada de “não observável”, com termos como “ordem de ligação”, ligações “covalentes” e “iônicas”, “cargas atômicas”, entre

outros.<sup>6</sup> O termo “não observável” é usado em oposição à linguagem “observável”, isto é, feita com base em operadores hermitianos que representam matematicamente as grandezas mensuráveis (chamadas de observáveis na linguagem da mecânica quântica).

A química procura explicações simples e intuitivas, que podem ser facilmente relacionadas com resultados experimentais. Como expressou Brian T. Sutcliffe:<sup>7</sup>

*“Chemistry is about synthesis. Physical Chemistry, Chemical Physics, Theoretical Chemistry, though endlessly interesting in their own right to those who choose to practice them, are, for the vast majority of working chemists, simply aids to synthesis. They need not be direct aids, this would be too much to ask, but they must somehow aid in the rationalizing process by which a synthesis can be anticipated or its outcome understood. Traditionally the chemical bond has been a major element in this rationalizing process.”*

A geometria, a estabilidade e a reatividade de moléculas são comumente explicadas por meio da análise do tamanho, da forma e da energia dos seus orbitais de valência. Mulliken, em 1932, denomina as funções de onda de um elétron de “orbital”.<sup>8</sup> Ele também distingue entre orbitais atômicos e moleculares, dependendo de o movimento do elétron ocorrer em um campo gerado, respectivamente, por um ou mais núcleos, além dos demais elétrons. Nesse trabalho, Mulliken tinha como objetivo não apenas determinar a forma dos orbitais moleculares, como também usá-los para explicar as propriedades químicas dos compostos.

O desenvolvimento da química teórico-computacional nas últimas décadas abriu caminho para o uso de orbitais não apenas de forma qualitativa, mas também quantitativa. Hoje, existem centenas de *softwares* que permitem o cálculo de propriedades eletrônicas de moléculas com base em modelos orbitais. Isso mostra a importância dos orbitais na interpretação das propriedades químicas dos compostos. Anna I. Krylov aponta que o químico se vê obrigado a raciocinar em termos de orbitais antes de aprender os fundamentos necessários de mecânica quântica:<sup>9</sup>

*“Just as a small child, without understanding its grammar and rules, learns to speak his native language with great effectiveness, chemists learn how to speak orbitals before they learn quantum mechanics.”*

Grande parte dos livros didáticos de química geral, inorgânica e orgânica inclui alguma discussão sobre o conceito de orbital em seus capítulos iniciais, muitas vezes antecedendo ao conteúdo básico da disciplina. Essa apresentação é geralmente feita de forma superficial e qualitativa, pois o leitor-alvo ainda não foi introduzido ao formalismo elementar da mecânica quântica. Entretanto,

a definição de orbital é necessária, pois fará parte do vocabulário usado na maior parte do restante do livro.

A origem do termo orbital baseia-se no modelo atômico de Bohr-Sommerfeld da antiga mecânica quântica,<sup>10</sup> em que os elétrons descrevem órbitas, semelhantes às dos planetas no sistema solar. Em mecânica quântica, a especificação de órbitas precisas é incompatível com o princípio de incerteza de Heisenberg, um dos fundamentos da teoria. Por essa razão, Mulliken afirma:<sup>4</sup>

*“... an orbital means, roughly, something like an orbit; or, more precisely, something as much like an orbit as is possible in quantum mechanics”.*

Em livros de físico-química, orbitais são definidos apenas após a introdução dos conceitos elementares da mecânica quântica, como os postulados, solução do átomo de hidrogênio, etc. Nessas circunstâncias, o estudante já possui o mínimo necessário para entender, de forma simples e objetiva, o que é orbital, tal como definido por Mulliken.<sup>8</sup> Por exemplo, no livro de físico-química,<sup>11</sup> de Atkins e de Paula, na página 326, os autores definem:

*“An atomic orbital is a one-electron wavefunction for an electron in an atom”.*

Definições semelhantes são encontradas em livros de química quântica,<sup>12–15</sup> alguns livros de química geral,<sup>16–18</sup> inorgânica<sup>19–22</sup> e orgânica.<sup>23</sup> Outros livros, entretanto, optam por tentar definir orbital de forma mais intuitiva, permitindo que o leitor com pouco ou nenhum conhecimento de mecânica quântica possa, no mínimo, realizar algum raciocínio prático usando a nova linguagem. No livro Química Geral, do autor Christian Braathen, uma seção inteira é dedicada à descrição da equação de Schrödinger e dos orbitais atômicos, afirmando que são conceitos fundamentais para o entendimento do átomo moderno.<sup>24</sup> Para tal, inicia-se a abordagem pela dualidade onda-partícula do elétron, culminando na frase:

*“Hoje, os químicos não pensam mais em órbitas, onde os elétrons giram a certa distância do núcleo. A ideia de órbitas foi substituída pela ideia de orbitais”*

Em seguida, o autor questiona: “Mas, então, o que são orbitais?”. Assim então definindo, segundo sua interpretação:

*“Orbitais são regiões no espaço atômico onde existe maior ou menor probabilidade de se encontrar elétrons. Ou seja, um orbital é uma distribuição de possibilidades de se encontrar um elétron em função da distância do mesmo até o núcleo do átomo.”*

Na versão em português do livro de Química Geral de Brady e Humiston, a primeira abordagem da definição de

orbital é realizada no capítulo sobre teoria atômica, assim descrito:<sup>25</sup>

*“Schrödinger resolveu, matematicamente, uma equação chamada de equação de onda. Ele obteve um conjunto de funções matemáticas chamadas de funções de onda, que descrevem as formas e as energias das ondas eletrônicas. Cada uma dessas possíveis ondas é chamada de orbital. Cada orbital em um átomo possui uma energia característica e é visto como uma descrição da região em torno do núcleo onde se espera poder encontrar o elétron.”*

O livro Química Geral, do autor John B. Russel, descreve na página 265:<sup>26</sup>

*“Os orbitais correspondem aos estados individuais que podem ser ocupados por um elétron em um átomo. (A escolha desta palavra é, algumas vezes, imprópria, porque a palavra orbital é derivada da palavra órbita usada por Bohr, mas não tem esse significado.) Por ora, é conveniente imaginar um orbital simplesmente como um nível de energia. Adiante (Seção 6.4), veremos que a palavra também corresponde à região do espaço de maior manifestação eletrônica”*

As transcrições acima mostram que muitos autores definem o orbital como uma região do espaço onde há probabilidade de se encontrar um elétron. Tal entendimento também está presente em livros de química orgânica e inorgânica. No livro Química Orgânica do Solomons e Fryhle,<sup>27</sup> os autores afirmam, na página GL-10, que orbital é

*“... um volume do espaço em torno do núcleo de um átomo onde existe uma alta probabilidade de se encontrar um elétron. Os orbitais são descritos matematicamente pelo quadrado das funções de onda...”*

Definição semelhante é encontrada no livro de autoria de Paula Y. Bruice.<sup>28</sup> Alguns livros de química inorgânica, como os de J. D. Lee, também apresentam definições semelhantes às anteriores. Na pág. 6 do livro Química Inorgânica não tão concisa (tradução da quinta edição inglesa) o autor escreve:<sup>29</sup>

*“No átomo de hidrogênio, o único elétron presente normalmente ocupa o nível de energia mais baixo, E<sub>1</sub>. Nesse caso o átomo encontra-se no seu estado fundamental. A correspondente função de onda  $\psi$  descreve o orbital, ou seja, um volume do espaço no qual há uma grande probabilidade de se encontrar o elétron.”*

É possível distinguir, essencialmente, duas definições em curso. A primeira identifica o orbital como uma função de

onda resultante da solução da equação de Schrödinger para um único elétron.<sup>11,12,16,17,19–21,23</sup> A segunda define orbital como uma região espacial onde a probabilidade de “encontrar” o elétron é alta.<sup>24–29</sup> Em um artigo recentemente publicado, os autores Márcio M. Lima e José L. P. B. Silva exploraram as origens e aspectos ontológicos envolvidos nessas duas definições.<sup>30</sup> Eles defendem que os dois conceitos são igualmente válidos, tornando necessário conhecer ambos e empregá-los da forma que for mais conveniente. Tal perspectiva pluralista também é defendida por outros autores, como Labarca e Lombardi, que afirmam:<sup>31</sup>

*“... the quantum world has no priority over the world of molecular chemistry: chemical entities do not need the support of quantum entities to legitimate their objective existence. From this perspective, orbitals exist in the ontology of molecular chemistry, in spite of the fact that they do not exist in the quantum world.”*

Essa visão pluralista não é amplamente aceita e tem sido amplamente combatida por diversos pesquisadores.<sup>32–36</sup>

O objetivo deste trabalho é elucidar alguns problemas relacionados à forma como os orbitais são apresentados aos alunos de disciplinas introdutórias de química. Parte das dificuldades em entender o conceito correto de orbital pode estar relacionada à má interpretação das figuras de orbitais apresentadas nos livros-texto e em artigos. Embora essas figuras contenham estruturas que encapsulam uma determinada região espacial, elas não correspondem aos orbitais, mas sim a representações da densidade de probabilidade. Mostraremos como essas imagens são produzidas e qual a relação entre elas e os orbitais. A ideia é manter a apresentação simples, porém formalmente correta, para que possa ser aproveitada por estudantes de diferentes níveis acadêmicos e por professores de diferentes especialidades. Na próxima seção, abordamos o conceito de orbital e densidade eletrônica em átomos hidrogenóides, estabelecendo o significado de “região com alta probabilidade de se encontrar o elétron”. Na seção 3, mostramos como criar imagens tridimensionais de harmônicos esféricos. Diferentes formas de gerar imagens de orbitais, normalmente encontradas em livros-texto de química, são apresentadas na seção 4. Uma breve discussão sobre representação de orbitais em moléculas é feita na seção 5. Por fim, as considerações finais são apresentadas na seção 6. Todos os códigos usados para gerar as figuras deste trabalho estão disponíveis gratuitamente no GitHub (<https://github.com/jgsmonteiro/Orbital-Plot>).

## 2. Orbitais e Densidade Eletrônica

O formalismo matemático da mecânica quântica é apresentado nos livros didáticos usando uma série de postulados que introduzem o conceito de função de

onda, operadores, e o caráter probabilístico de medidas de uma grandeza física.<sup>12,14,37</sup> Nessa estrutura axiomática, a confirmação da teoria é feita *a posteriori*, por meio do confronto dos resultados obtidos com os experimentos disponíveis. Nas palavras de Dirac:<sup>38</sup>

*“The justification of the whole scheme depends on the agreement of the final results with experiments”.*

Um dos postulados da mecânica quântica estabelece que o estado de um sistema físico é caracterizado por uma função de onda, que depende da posição e do tempo.<sup>12-14,37</sup> A equação de Schrödinger independente do tempo pode ser escrita como

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (1)$$

onde  $\hat{H}$  é chamado de operador hamiltoniano, contendo os operadores de energia cinética e energia potencial de todas as partículas que compõem o sistema. A equação (1) fornece como resultado um conjunto de autofunções  $\{\psi_n\}$  e autovalores de energia  $\{E_n\}$ . Em grande parte dos sistemas de interesse em química,  $n$  é um inteiro não negativo.

A equação de Schrödinger independente do tempo (1) de átomos hidrogenóides (que contêm apenas um elétron, ex.: H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>, etc) pode ser escrita como:<sup>37</sup>

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi_{nlm_l} = E_n \psi_{nlm_l} \quad (2)$$

onde o primeiro termo representa a energia cinética do elétron de massa  $m_e$ , e o segundo é a energia potencial eletrostática de atração entre o elétron de carga  $-e$  e o núcleo de carga  $+Ze$ , sendo  $Z$  o número atômico. As constantes fundamentais  $\hbar$  e  $\epsilon_0$  representam a constante de Planck dividida por  $2\pi$  e permissividade elétrica no vácuo, respectivamente. Os níveis de energia  $\{E_n\}$  dependem apenas do número quântico principal  $n$  e são dados pela expressão (3):<sup>12,14</sup>

$$E_n = - \left( \frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right) \frac{Z^2}{n^2} \quad (3)$$

onde todos os termos entre parênteses são constantes fundamentais, cujos valores são tabelados e podem ser encontrados em tabelas de constantes físico-químicas.<sup>12-14</sup> A validade da solução apresentada pode ser verificada comparando os dados espectroscópicos disponíveis para o átomo de hidrogênio ( $Z = 1$ ) com os valores esperados para transições entre diferentes níveis de energia (4):

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = (13,6057 \text{ eV}) \left( \frac{1}{n_2} - \frac{1}{n_1} \right) \quad (4)$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda da radiação eletromagnética absorvida ou emitida,  $h$  é a constante de Planck e

$c$  é a velocidade da luz no vácuo. Os valores das transições energéticas calculados por meio da equação (4) apresentam um excelente acordo com o espectro do átomo de hidrogênio.

As funções de onda que surgem como soluções de (2) são indexadas por três números quânticos ( $n, l, m_l$ ), representando o número quântico principal, o número quântico azimutal (ou de momento angular) e a projeção do momento angular orbital no eixo  $z$ . As restrições nos números quânticos são:  $n > 0$ ,  $0 \leq l \leq n - 1$ ,  $-l \leq m_l \leq l$ , respectivamente. As soluções  $\psi_{nlm_l}$  são geralmente chamadas de orbitais atômicos. Neste contexto, orbitais atômicos são definidos como as soluções eletrônicas do átomo de hidrogênio. A solução  $\psi_{100}$  ( $n = 1, l = m_l = 0$ ) é chamada de orbital “1s”; a solução  $\psi_{200}$  ( $n = 2, l = m_l = 0$ ), de “2s”;  $\psi_{210}$  ( $n = 2, l = 1, m_l = 0$ ) de “2p<sub>z</sub>”. Os orbitais denominados “2p<sub>x</sub>” e “2p<sub>y</sub>” surgem como combinações lineares de  $\psi_{211}$  e  $\psi_{21-1}$ . Note que, na ausência de perturbações, todos os estados com o mesmo número quântico principal são degenerados. Logo, as soluções “2p<sub>x</sub>” e “2p<sub>y</sub>” ou  $\psi_{211}$  e  $\psi_{21-1}$  são igualmente válidas e possuem a mesma energia.

Como podemos interpretar os orbitais atômicos obtidos da solução da equação (2)? Para responder a esta pergunta, vamos definir a densidade de probabilidade  $\rho(r)$  como o módulo da função de onda ao quadrado, ou seja, o significado de  $\rho(r)$  segue do postulado de Born<sup>39</sup> da mecânica quântica, que estabelece que a probabilidade  $dP(r)$  de se encontrar a partícula em uma região do espaço  $dV$ , em torno da posição  $r$ , é dada por (5):

$$dP(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) dV = |\psi(\mathbf{r})|^2 dV \quad (5)$$

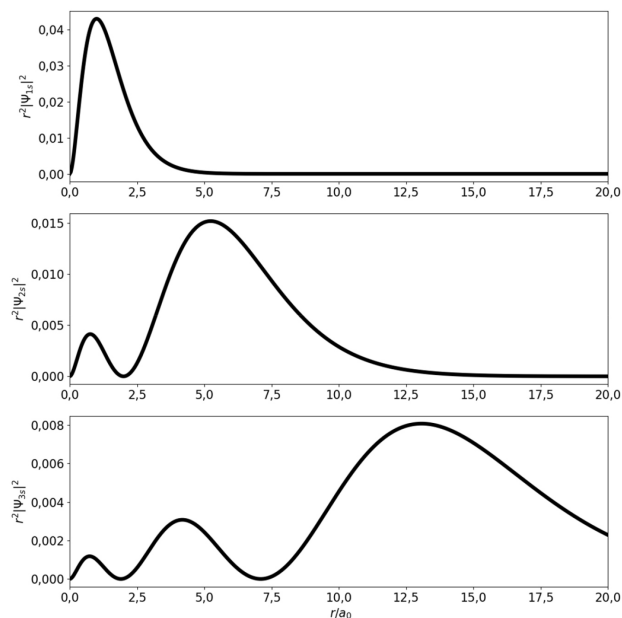
O fato de o módulo ao quadrado da função de onda ser quadrado-integrável garante que a integral da equação (5) em todo o espaço converge a um valor finito. Se a função for normalizada, esse valor é igual a 1. A densidade de probabilidade definida acima depende da posição do elétron no espaço tridimensional, definida pelo vetor posição  $r$ . Podemos simplificar o problema ao definir a densidade de probabilidade radial, obtida pela integração sobre toda a dependência angular. Outro nome equivalente encontrado na literatura para essa densidade é a função de distribuição radial, uma vez que ela representa a distribuição radial da probabilidade de se encontrar o elétron. Matematicamente, obtém-se uma função que depende apenas da distância elétron-núcleo,  $r$ , e não da direção (6):

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = r^2 |R_n(r)|^2 dr \quad (6)$$

Note que a densidade de probabilidade radial,  $r^2 |R_n(r)|^2$ , depende dos números quânticos  $n$  e  $l$ , mas não de  $m_l$ . A análise gráfica dessa função permite identificar as regiões com alta densidade eletrônica. Na Figura 1 são mostradas as densidades de probabilidade radial de alguns orbitais atômicos do átomo de hidrogênio. As regiões com maior



probabilidade de se encontrar o elétron são justamente as que possuem maiores densidades eletrônicas. Por exemplo, para um elétron no nível descrito pelo orbital 1s, a maior parte da densidade eletrônica encontra-se no interior de uma esfera de raio  $r < 5a_0$ , sendo o raio de Bohr  $a_0 = 5,29 \times 10^{-11}$  m.



**Figura 1.** De cima para baixo, densidades de probabilidade radial dos orbitais 1s, 2s e 3s do átomo de hidrogênio

Analisando a Figura 1, é possível perceber que a densidade eletrônica do orbital 1s é desprezível a uma distância superior a  $5a_0$ . Já para o elétron no nível 3s, a região com alta densidade eletrônica encontra-se na região circular  $7a_0 < r < 20a_0$ . Essa diferença entre as densidades eletrônicas dos níveis 1s e 3s nos permite inferir que o elétron no nível 3s é encontrado com maior probabilidade em regiões mais distantes do núcleo do que o elétron no nível 1s. É importante destacar que, em ambos os níveis, o elétron pode ser encontrado, por exemplo, a uma distância igual a  $0,5a_0$ ; porém, essa possibilidade é maior em 1s do que em 3s. O orbital 2s, por sua vez, possui uma distribuição intermediária entre o 1s e o 3s. A região de alta densidade está localizada no intervalo  $2,5a_0 < r < 12,5a_0$ .

Um detalhe importante a ser notado em algumas das densidades eletrônicas apresentadas na Figura 1 é a presença de pontos em que a função é nula. Esses pontos são chamados de nós, ou nodos. Como ilustração, considere a distribuição radial do orbital 2s:  $r^2 |R_{20}(r)|^2 = (2a_0)^{-3} r^2 [2 - (r/a_0)]^2 e^{-r/a_0}$ . Os nós podem ser determinados encontrando os valores de  $r > 0$  tais que  $r^2 |R_{20}(r)|^2 = 0$ . Neste caso, há apenas um valor, que é  $r = 2a_0$ . Já a distribuição 3s apresenta dois nós, aproximadamente em  $1,9a_0$  e  $7,1a_0$ . A quantidade de nós radiais em um orbital com número quântico principal  $n$  é de  $n - 1$ .

Os máximos da distribuição são determinados pelos valores de  $r$  que satisfazem a equação  $d(r^2 |R_n(r)|^2)/dr = 0$ .

Esses máximos representam os pontos em torno dos quais há maior probabilidade de o elétron se encontrar. Para o nível 2s, há dois máximos localizados em  $r = 0,746a_0$  e  $r = 5,236a_0$  (ver Figura 1), sendo o primeiro um máximo local e o segundo, global.

A probabilidade de se encontrar o elétron em uma região esférica pode ser obtida integrando a equação (6). Por exemplo, para o orbital 1s, nota-se que o elétron se concentra a uma distância  $r < 5a_0$ . A probabilidade de se encontrar o elétron nessa região pode ser calculada através de:

$$P_{10}(r < 5a_0) = \int_0^{5a_0} r^2 |R_{10}(r)|^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^{5a_0} e^{-2r/a_0} r^2 dr = 0,99 \quad (7)$$

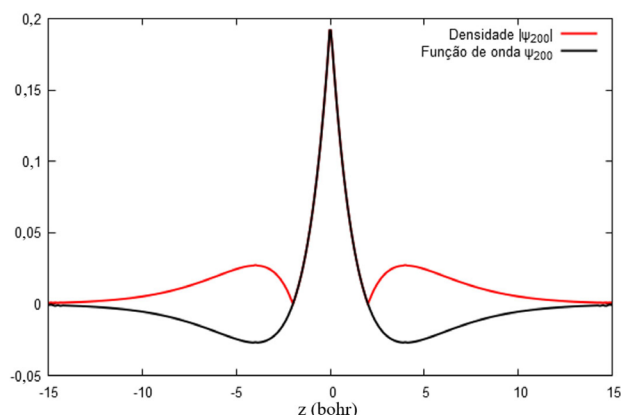
Logo, a probabilidade de encontrar um elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio em uma esfera de raio  $5a_0$  é de 99%. Cálculos semelhantes podem ser feitos para os demais orbitais. Para o orbital 2s, a probabilidade de encontrar o elétron na região  $3a_0 < r < 8a_0$  é

$$P_{20}(3a_0 < r < 8a_0) = \int_{3a_0}^{8a_0} r^2 |R_{20}(r)|^2 dr = \frac{1}{8a_0^3} \int_{3a_0}^{8a_0} r^2 [2 - (r/a_0)]^2 e^{-r/a_0} dr = 0,74 \quad (8)$$

Para um elétron 2p, na região delimitada por  $a_0 < r < 8a_0$ , a probabilidade é

$$P_{21}(a_0 < r < 8a_0) = \int_{a_0}^{8a_0} r^2 |R_{21}(r)|^2 dr = \frac{1}{24a_0^5} \int_{a_0}^{8a_0} e^{-r/a_0} r^4 dr = 0,90 \quad (9)$$

Os exemplos acima demonstram que a probabilidade de se encontrar o elétron em uma dada região é calculada a partir da densidade eletrônica, ou densidade de probabilidade. Graficamente, a probabilidade de o elétron se encontrar em uma dada região é igual à área sob a curva. Os orbitais (funções de onda) são usados para calcular a densidade eletrônica, no entanto, é esta última que, de fato, é usada nos cálculos das propriedades atômicas e moleculares. A função de onda representa a amplitude de probabilidade, pois é usada como entrada no cálculo da densidade. É importante lembrar que, ao contrário do que ocorre com  $\rho(r)$ , a função de onda pode assumir valores negativos ou imaginários. A Figura 2 mostra, em um mesmo gráfico, o orbital 2s ( $\psi_{200}$ ) junto com a raiz quadrada da densidade de probabilidade  $|\psi_{200}|^2$  ao longo da direção  $z$ . Como a função de onda  $\psi_{200}$  é esfericamente simétrica, ela tem a mesma forma em qualquer direção espacial. É possível notar que  $\psi_{200}$  apresenta regiões positivas e negativas, indicando uma mudança de fase de 0 para  $\pi$ . Por outro lado,  $|\psi_{200}|^2$  é sempre positiva. No orbital 2s, o nó ocorre por consequência da forma da função radial  $R_{20}(r)$ .



**Figura 2.** Função de onda e densidade de probabilidade do orbital  $2s$  ( $n = 2, l = m_l = 0$ ) do átomo de hidrogênio ao longo da direção  $z$ . A densidade de probabilidade é positiva em todo o intervalo, enquanto a função de onda é negativa em valores de  $|z| > 2a_0$ .

Para finalizar esta seção, destacamos que a densidade de probabilidade (eletrônica) determina as regiões de maior probabilidade de o elétron se encontrar. A análise gráfica da densidade radial permite identificar as regiões de alta densidade eletrônica. Entretanto, **o orbital não é a região, mas sim a função de onda usada para determinar a densidade eletrônica!**

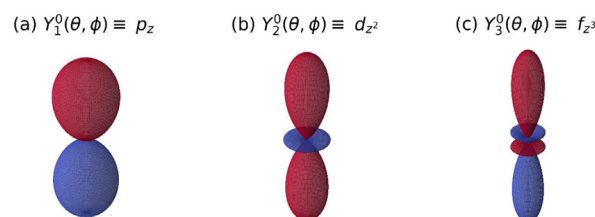
### 3. Representações Polares dos Harmônicos Esféricos

Na seção anterior, mostramos que a densidade de probabilidade radial é usada para determinar as distâncias em relação ao núcleo, onde há maior ou menor densidade eletrônica. Porém, devido às integrais em  $\theta$  e  $\phi$  presentes na equação (6), cuja integração nos limites indicados resulta no fator constante  $4\pi$ , não temos informações sobre a distribuição angular do elétron em torno do núcleo. Para os subníveis  $s$ , esfericamente simétricos, não há perda significativa de informação no cálculo da distribuição radial. Para os demais subníveis, entretanto, as informações contidas nos harmônicos esféricos são perdidas no cálculo da densidade radial. A parte polar dos orbitais atômicos é frequentemente apresentada em livros-texto por meio de representações polares.<sup>14</sup>

Como os harmônicos esféricos são funções das coordenadas angulares  $\theta$  e  $\phi$ , sua representação em eixos cartesianos não é trivial. A estratégia adotada nas representações polares da função de onda é a seguinte: para um determinado valor de  $(\theta, \phi)$ , estima-se um raio  $R$  tal que  $R \propto |Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ . Assim, podemos obter as componentes  $(x, y, z)$  usando as seguintes relações entre coordenadas cartesianas e esféricas:

$$\begin{aligned} x &= R \sin\theta \cos\phi \\ y &= R \sin\theta \sin\phi \\ z &= R \cos\theta \end{aligned} \quad (10)$$

Essa metodologia foi usada para obter os harmônicos mostrados na Figura 3. É importante destacar que as imagens apresentadas não contêm nenhuma informação sobre a distribuição radial do orbital. O significado da distância da superfície até a origem foi arbitrariamente escolhido como sendo igual ao módulo ao quadrado do harmônico esférico  $Y_l^m(\theta, \phi)$  na direção angular  $(\theta, \phi)$ . As porções em vermelho e azul representam regiões em que a função é positiva e negativa, respectivamente.



**Figura 3.** Harmônicos esféricos correspondentes à parte angular dos orbitais (a)  $p_z$ , (b)  $d_z^2$  e (c)  $f_z^3$ . A quantidade de nós angulares é  $l - |m_l|$ .

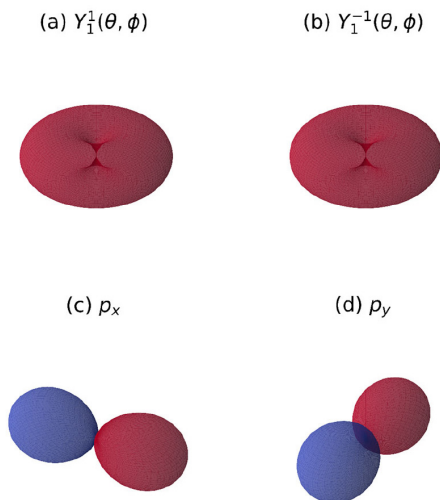
Os harmônicos esféricos mostrados na Figura 3 possuem uma característica em comum: são funções reais de suas variáveis, pois  $m_l = 0$ . Por outro lado, os harmônicos esféricos com  $m_l \neq 0$  são funções complexas. Se empregarmos o mesmo procedimento para gerar imagens dos harmônicos  $Y_l^{\pm 1}(\theta, \phi)$ , obteremos o resultado apresentado em (a) e (b) da Figura 4. Elas em nada se assemelham às imagens de  $p_x$  e  $p_y$  apresentadas nos livros-texto. Para obter  $p_x$  e  $p_y$  (Figura 4d), é preciso realizar as seguintes combinações lineares dos harmônicos esféricos  $Y_l^{\pm 1}(\theta, \phi)$ :

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^{-1} - Y_1^{+1}) \\ p_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_1^{-1} + Y_1^{+1}) \end{aligned} \quad (11)$$

Os orbitais  $d(l = 2)$  também apresentam funções reais e complexas, dependendo do valor do número quântico  $m_l$ . A função  $d_{z^2}$  mostrada na Figura 3 é real, pois  $m_l = 0$ . Entretanto, para as demais funções  $d$  é preciso fazer combinações lineares para eliminar a componente complexa:

$$\begin{aligned} d_{x^2-y^2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{+2} + Y_2^{-2}) \\ d_{xy} &= \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_2^{-2} - Y_2^{+2}) \\ d_{yz} &= \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_2^{+1} - Y_2^{-1}) \\ d_{zx} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{+1} + Y_2^{-1}) \end{aligned} \quad (12)$$

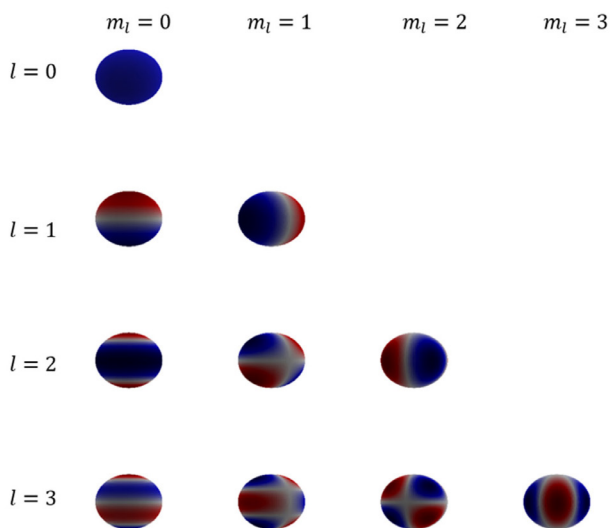
Outra forma equivalente de visualizar os harmônicos esféricos é por meio da contagem de nós ao longo das direções  $\theta$  e  $\phi$ . Uma esfera é construída e dividida em



**Figura 4.** Representação de parte real dos harmônicos esféricos (a)  $Y_1^1(\theta, \phi)$  e (b)  $Y_1^{-1}(\theta, \phi)$ . As combinações (c)  $p_x = (Y_1^1(\theta, \phi) - Y_1^{-1}(\theta, \phi))/\sqrt{2}$  e (d)  $p_y = i(Y_1^1(\theta, \phi) + Y_1^{-1}(\theta, \phi))/\sqrt{2}$  são funções reais com  $l = 1$ , mas com  $m_l$  indefinido

setores, separados por linhas latitudinais e longitudinais, de modo que ao longo dessas linhas:  $Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = 0$ . Essas linhas formam círculos concêntricos dispostos ao longo da esfera. Os círculos latitudinais representam os nós ao longo de  $\theta$  e sua quantidade é igual a  $l - |m_l|$ . Já as  $|m_l|$  linhas longitudinais representam os nós ao longo de  $\phi$ . Assim como na representação polar, regiões em que a função é positiva ou negativa são diferenciadas pela coloração. A Figura 5 mostra a imagem de alguns harmônicos esféricos usando essa representação. As linhas brancas representam os zeros dos harmônicos esféricos.  $Y_0^0$  possui nenhum zero, logo a esfera é uniforme. Já  $Y_1^0$  possui um zero latitudinal, enquanto  $Y_1^{\pm 1}$  possuem um zero longitudinal.

A discussão apresentada nesta subseção demonstra que a representação tridimensional dos harmônicos esféricos não



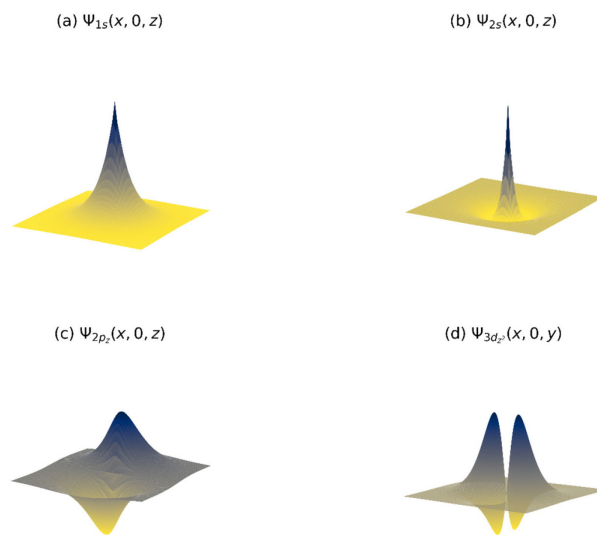
**Figura 5.** Representação alternativa dos harmônicos esféricos  $Y_l^{m_l}$ , com  $l = 0, 1, 2, 3$  e  $|m_l| \leq l$

é única. A forma como enxergamos os harmônicos esféricos está fortemente atrelada à representação utilizada nos livros. Porém, existem outras formas equivalentes de representar o mesmo objeto matemático, como mostrado na Figura 5. Lembrando, ainda, que os harmônicos esféricos são funções matemáticas que aparecem em vários outros ramos da física, além da estrutura eletrônica de átomos e moléculas, como na teoria eletromagnética clássica.<sup>41</sup>

## 4. Orbitais Atômicos

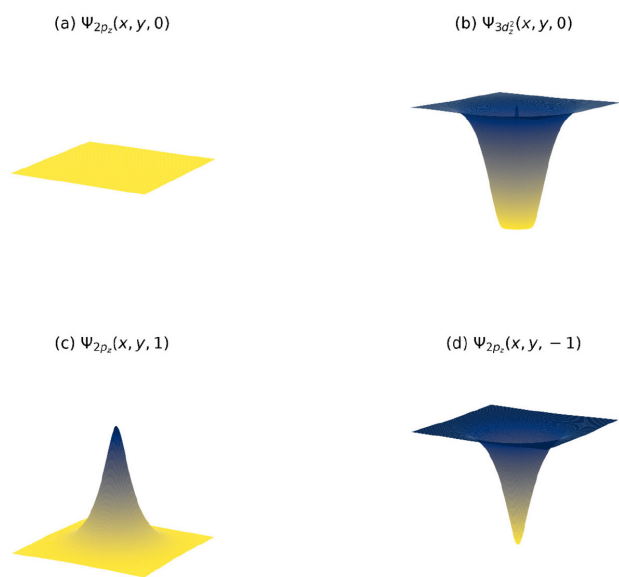
Para obter a densidade eletrônica incluindo a parte radial e angular, é preciso representar  $\rho(r)$  nas componentes  $x, y$  e  $z$  (ou  $r, \theta$  e  $\phi$ ). Nesta seção, veremos algumas técnicas usadas para representar uma função tridimensional, como  $\rho(r)$  ou  $|\psi(r)| = \sqrt{\rho(r)}$ . A grande dificuldade da representação da densidade eletrônica e da função de onda é que precisamos de quatro eixos para representar o valor da função em um ponto  $(x, y, z)$ . Se fixarmos uma das coordenadas, podemos representar a função em um gráfico tridimensional. A escolha da coordenada a fixar é motivada pela simetria do sistema. Esse tipo de representação é chamado de *density* ou *surface plot*.<sup>42</sup> A Figura 6 mostra a representação dos orbitais  $1s$  ( $\psi_{100}$ ),  $2s$  ( $\psi_{200}$ ),  $2p_z$  ( $\psi_{210}$ ) e  $3d_{z^2}$  ( $\psi_{320}$ ) no plano  $x \times z$ . Como os orbitais  $s$  são esfericamente simétricos, não há dependência da representação com o plano escolhido. Isto é, em qualquer um dos planos cartesianos  $xy, xz$  ou  $yz$ , a imagem será igual às (a) e (b) da Figura 6. Os orbitais  $1s$  e  $2s$  possuem uma amplitude de probabilidade concentrada em torno da origem. Essa amplitude decai exponencialmente a zero no caso do  $1s$ . Já o orbital  $2s$  possui um poço radial em  $r = 4a_0$ , que se aproxima assintoticamente de zero quando  $r \rightarrow \infty$ .

Os orbitais  $p$  e  $d$  dependem de ângulo e, portanto, são representados de forma diferente conforme o plano



**Figura 6.** Surface plot dos orbitais  $1s$  (a),  $2s$  (b),  $2p_z$  (c) e  $3d_{z^2}$  (d) ao longo do plano  $x0z$

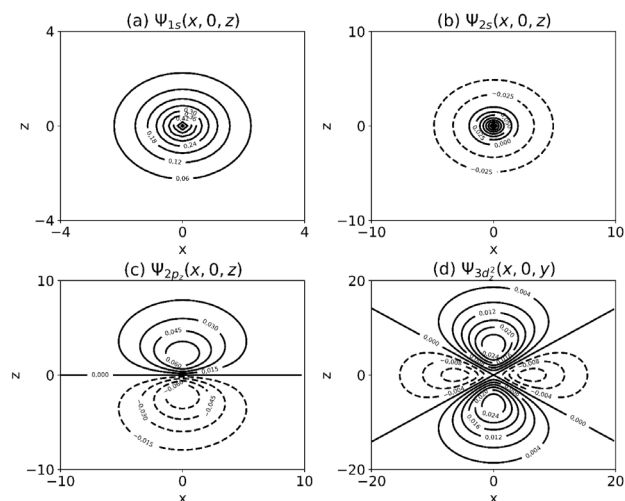
escolhido. Os orbitais  $2p_z$  (Figura 6c) e  $3d_{z^2}$  (Figura 6d) são representados no plano  $xz$ . O orbital  $2p_z$  possui dois lobos, com amplitude de probabilidade positiva (em azul) e negativa (em amarelo) na Figura 6c. O orbital  $2p_z$  no plano  $xy$  (Figura 7a) é identicamente nulo devido ao nó angular em  $\theta = \pi/2$ . Porém, em um plano paralelo ( $z = \pm 1$ ), ele apresenta um pico com amplitude de probabilidade positiva (Figura 7c, plano  $z = +1$ ) e negativa (Figura 7d, plano  $z = -1$ ).



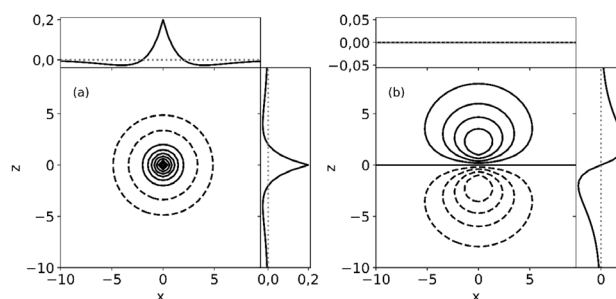
**Figura 7.** Surface plot dos orbitais (a)  $2p_z$  e (b)  $3d_{z^2}$  no plano  $xy$ , do orbital  $2p_z$  (c) no plano  $xy$  e (d) no plano  $xy$

A técnica de *density plot*, usada para gerar as Figuras 5 e 6, também permite uma representação bidimensional por meio de curvas de nível, em que cada linha representa o conjunto de pontos em que a função tem o mesmo valor (amplitude). A representação dos orbitais mostrados na Figura 6, na forma de curvas de nível, é apresentada na Figura 8. Os valores destacados representam a amplitude da função de onda ao longo do contorno. Valores negativos da função de onda são representados por contornos tracejados. Nesse tipo de representação, os nós dos orbitais se tornam evidentes, como pode ser visto nas Figura 8c e Figura 8d. O espaçamento entre os contornos é uma informação importante nesse tipo de representação, principalmente se o objetivo é comparar orbitais com tamanhos muito diferentes.

Uma forma alternativa de visualizar as curvas de nível é apresentada na Figura 9 para os orbitais  $2s$  e  $2p_z$ . Os gráficos acima e na lateral representam a função de onda ao longo dos eixos  $x$  e  $z$ , respectivamente. A Figura 9a mostra que o orbital  $2s$  possui a mesma forma em ambos os eixos, tornando-o invariante sob uma rotação do sistema de eixos. Já na Figura 9b, destaca-se a diferença da função de onda  $2p_z$  ao longo dos eixos  $x$  e  $z$ . A parte superior da Figura 9b mostra a função de onda  $2p_z$  ao longo do eixo  $x$ , isto é  $\psi_{2p_z}(x, 0, 0)$ , que é identicamente nula. Já o gráfico



**Figura 8.** Curva de nível dos orbitais  $1s$  (a),  $2s$  (b),  $2p_z$  (c) e  $3d_{z^2}$  (d) no plano  $x0z$ . Contornos tracejados representam as amplitudes negativas da função de onda. Os valores indicados representam a amplitude da função de onda no contorno. Todos os valores estão em unidades atômicas



**Figura 9.** Curvas de nível dos orbitais  $2s$  (a) e  $2p_z$  (b) no plano  $x0z$ . Os gráficos acima e à direita representam a função de onda ao longo dos eixos  $x$  e  $z$ , respectivamente. Todos os valores estão em unidades atômicas

à direita da Figura 9b mostra  $\psi_{2p_z}(0, 0, z)$ , com extremos em  $z = \pm 2a_0$ .

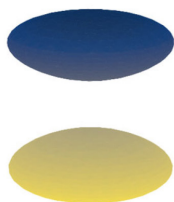
A representação de orbitais ou da densidade eletrônica, sem fixar qualquer coordenada espacial, pode ser feita por meio do *shape plot*.<sup>42</sup> Nesse tipo de representação, a forma da função é representada espacialmente escolhendo o conjunto de pontos  $(x, y, z)$  tais que  $|\psi(x, y, z)| = c$ , onde  $c$  é um valor pré-estabelecido. Esse tipo de representação é mais comumente denominado *isosurface*.<sup>43</sup> Esse tipo de gráfico demanda um custo computacional maior do que as representações de densidade e superfície (*density* e *surface plots*).<sup>44</sup>

A Figura 10 apresenta representações do orbital  $3d_{z^2}$ , com valores distintos do contorno  $c$ , obtidas pelo algoritmo de Marching Cubes.<sup>45</sup> É possível perceber como a escolha do valor do contorno afeta a extensão da representação do orbital. Quanto menor o valor de  $c$ , maior é a extensão da função de onda. Valores muito altos implicam em uma figura com menos detalhes, como na Figura 10a. Por outro lado, diminuir consideravelmente o contorno pode produzir



imagens com regiões sobrepostas, como nas Figura 10c e 10d. O ideal é escolher um contorno que permita visualizar a estrutura nodal, como na Figura 10b. Em situações práticas, a escolha do contorno é feita por tentativa e erro.

(a)  $c = \max(\psi_{3d_z})/2$



(b)  $c = \max(\psi_{3d_z})/5$



(c)  $c = \max(\psi_{3d_z})/10$



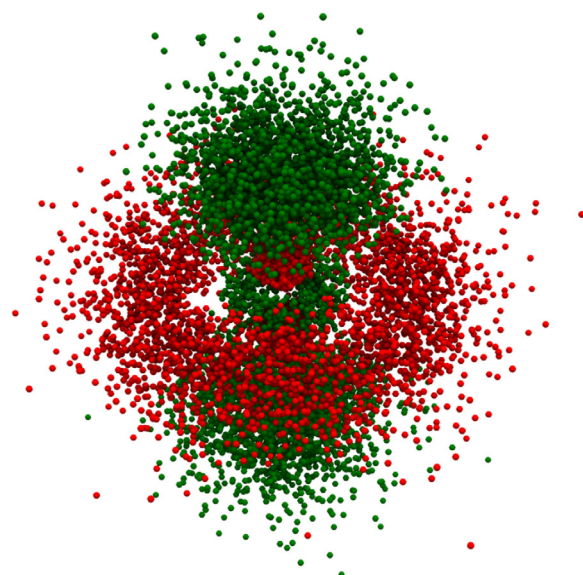
(d)  $c = \max(\psi_{3d_z})/100$



**Figura 10.** *Isosurfaces* do orbital  $3d_z$  com diferentes contornos  $c$ . Em (a) o contorno é escolhido de tal modo que a função de onda tem metade do valor máximo. Nos demais casos, o orbital possui uma amplitude de probabilidade igual a (b) 1/5, (c) 1/10 e (d) 1/100 do valor máximo

Métodos de Monte Carlo permitem gerar figuras da densidade eletrônica através da distribuição espacial de pontos, como mostrado na Figura 11. A concentração de pontos é proporcional à densidade eletrônica em uma dada região, o que equivale à probabilidade de encontrar o elétron no elemento de volume correspondente. Os pontos foram coloridos de acordo com o sinal da função de onda, o que permite representar a fase (sinal) dos orbitais. É importante destacar que a densidade de pontos é proporcional à densidade eletrônica  $|\psi|^2$ , e não ao orbital  $\psi$ . A coloração dos pontos é adicionada de forma ‘artificial’, apenas como recurso para mostrar regiões com fases contrárias. Esse tipo de representação também pode ser feita na forma de “*foggy plot*”.<sup>43</sup> Mais detalhes sobre a utilização de métodos de Monte Carlo podem ser encontrados na literatura.<sup>46</sup>

Do ponto de vista pedagógico, as imagens da Figura 11 podem ser interpretadas de forma intuitiva, facilitando a compreensão, por parte dos alunos, do significado da densidade de probabilidade. Vamos supor o seguinte experimento mental: considere um equipamento no qual a posição instantânea do elétron no átomo de hidrogênio pudesse ser determinada. Se uma série de medidas equivalentes fosse realizada, cada uma resultaria em uma posição distinta, que seria registrada em um sistema cartesiano de eixos. Após um número muito grande de



**Figura 11.** Density plot do orbital atômico  $4d_z$ , gerado usando *direct sampling* com auxílio do PyVista.<sup>47</sup> As cores são usadas para diferenciar regiões com fases opostas da função de onda. A densidade de pontos é maior nas regiões com maior densidade de probabilidade  $|\psi|^2$

medidas, obteríamos uma distribuição semelhante à Figura 11, associada à densidade de probabilidade do elétron no estado  $4d_z$ . O importante desse exercício é que o aluno compreenda que o elétron seria encontrado com maior frequência nas regiões de maior densidade de pontos (alta densidade de probabilidade). Outro ponto interessante que pode ser extraído da Figura 11 diz respeito à ausência de densidade eletrônica nas regiões onde há nós. A função de onda sofre uma mudança de fase igual a  $\pi$  quando troca de sinal, sendo nula. Portanto, a probabilidade de encontrar o elétron nos nós é nula.

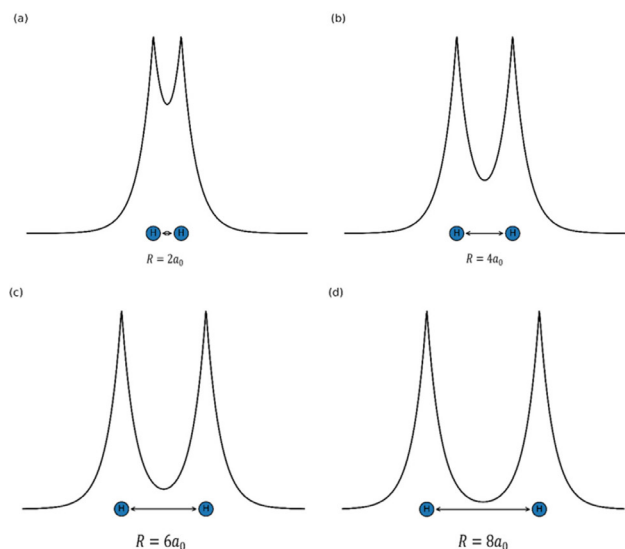
## 5. Orbitais em Moléculas

A discussão da representação de orbitais em sistemas com mais de um elétron vai além do escopo deste trabalho. Entretanto, há um sistema em particular, razoavelmente simples, no qual podemos aplicar as técnicas apresentadas nas seções anteriores. Na molécula de  $H_2^+$  a função de onda eletrônica do estado fundamental pode ser expressa, aproximadamente, como uma combinação linear de orbitais atômicos.<sup>14</sup> Considerando uma base mínima, onde cada orbital atômico é composto apenas pela função de onda  $1s$  do átomo de hidrogênio, podemos escrever que:

$$\psi_g = \frac{\psi_{1s,a} + \psi_{1s,b}}{\sqrt{2(1+S)}} \quad (13)$$

onde  $\psi_{1s,a}$  e  $\psi_{1s,b}$  representam o orbital  $1s$  centrado nos núcleos a e b, respectivamente. A integral de sobreposição  $S = \langle \psi_{1s,a} | \psi_{1s,b} \rangle$  é uma função da distância internuclear  $R$ . O denominador  $\sqrt{2(1+S)}$  garante que a função de onda  $\psi_g$  seja normalizada, isto é,  $\langle \psi_g | \psi_g \rangle = 1$ .

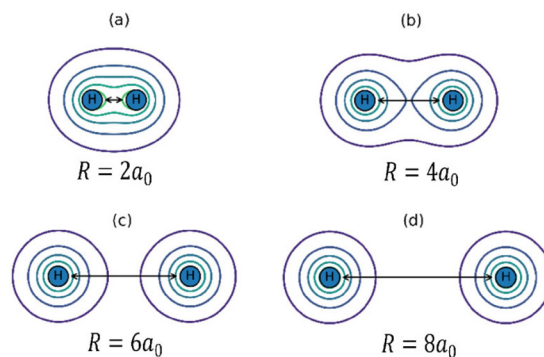
Podemos empregar qualquer uma das técnicas anteriores para visualizar o orbital  $\psi_g$ . Uma representação usual de  $\psi_g$  consiste na fixação das coordenadas  $x = y = 0$  e na análise da densidade eletrônica  $\rho_g = |\psi_g|$  ao longo do eixo  $z$ , que coincide com o eixo em que residem os núcleos. Tal gráfico é apresentado na Figura 12 considerando diferentes valores de  $R$ . É possível notar um aumento da densidade eletrônica entre os núcleos à medida que diminui  $R$ . A origem desse aumento da densidade eletrônica pode ser atribuída a uma redução da energia cinética do elétron, devido à diminuição do gradiente  $\nabla\psi_g$ .<sup>48</sup>



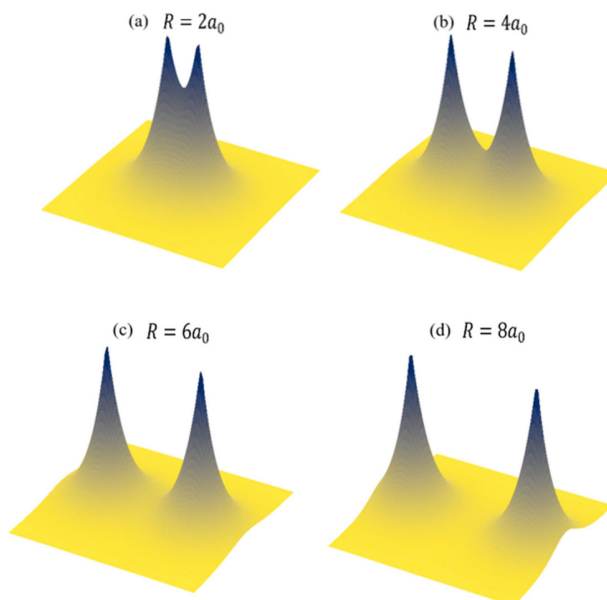
**Figura 12.** Densidade eletrônica aproximada para a molécula de  $H_2^+$  em função da distância internuclear  $R$ . Os núcleos localizam-se em  $z_a = -R/2$  e  $z_b = R/2$ . As linhas pretas representam o valor da densidade eletrônica  $\rho_g(0, 0, z)$

Outra representação possível dos orbitais é por meio de curvas de nível. Escolhendo o plano  $xz$  (fixando  $y = 0$ ), obtém-se a Figura 13 para diferentes valores de  $R$ . A uma distância de  $R = 8a_0$ , a densidade eletrônica corresponde aproximadamente à densidade eletrônica de dois orbitais  $1s$  concentrados em torno de cada um dos núcleos. Pela simetria da molécula de  $H_2^+$ , a probabilidade de o elétron se encontrar em torno de qualquer um dos núcleos é a mesma. A diminuição de  $R$  para  $6a_0$  provoca uma deslocalização da densidade eletrônica, resultando em um aumento da densidade na região internuclear, o que se torna ainda mais significativo em  $R = 4a_0$ . Em uma separação de  $2a_0$ , os contornos de mesmo valor, mostrados na Figura 13a, permeiam ambos os núcleos. A versão tridimensional é apresentada na Figura 14. As observações são as mesmas feitas anteriormente com relação ao aumento da amplitude de probabilidade na região internuclear com a diminuição de  $R$ .

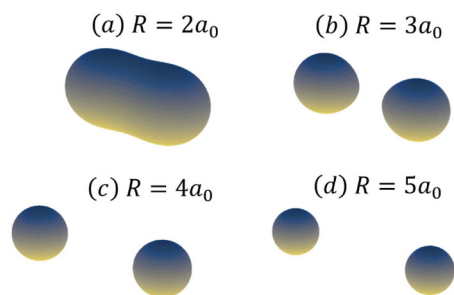
Podemos representar a função de onda através das *isosurfaces*, usando o algoritmo de Marching Cubes. A Figura 15 apresenta os orbitais em diferentes valores de  $R$ , com um contorno  $c = \max\sqrt{\rho_g}/2$ . A deslocalização dos orbitais é pouco perceptível visualmente em distâncias  $R \geq 4a_0$ . Mas, em  $R = 3a_0$ , é possível perceber que os orbitais



**Figura 13.** Curvas de nível da densidade eletrônica  $\rho_g(x, 0, z)$  no plano  $xz$  para diferentes distâncias internuclear  $R$



**Figura 14.** Superfícies da densidade eletrônica  $\rho_g(x, 0, z)$  no plano  $xz$ , considerando diferentes distâncias internuclear  $R$

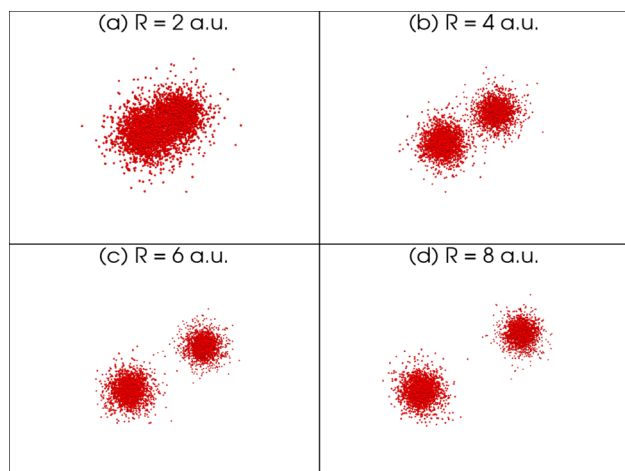


**Figura 15.** Densidade eletrônica  $\rho_g(x, y, z)$  obtida usando o algoritmo de Marching Cubes. Os orbitais foram calculados em diferentes distâncias internucleares contorno  $c = \max\sqrt{\rho_g}/2$

atômicos se deslocam em direção ao núcleo oposto. Em  $R = 2a_0$ , a função de onda está deslocalizada por ambos os núcleos, apresentando uma alta densidade eletrônica na região internuclear.

Por fim, é possível utilizar *direct sampling*, em conjunto com o PyVista, para gerar a densidade eletrônica  $\rho_g$ , conforme apresentado na Figura 16. Para distâncias

curtas, a densidade de pontos é elevada em toda a região internuclear, o que impossibilita a distinção da posição de cada núcleo. Com o aumento de  $R$ , a densidade de pontos diminui na região entre os núcleos, concentrando-se nos extremos  $\pm R/2$ . Para valores de  $R$  suficientemente altos, a probabilidade de encontrar um elétron na região internuclear se torna desprezível.



**Figura 16.** Densidade, usando o método de amostragem direta e o módulo PyVista, da densidade eletrônica  $\rho_g$  da molécula de  $H_2^+$  em diferentes separações internucleares

## 6. Considerações Finais

Formalmente, o orbital é definido como uma função de onda, solução da equação de Schrödinger independente do tempo para um elétron. Suas propriedades decorrem diretamente dos princípios fundamentais da mecânica quântica e, portanto, sua interpretação deve estar em consonância com esses princípios. Neste trabalho, discutiu-se como os orbitais atômicos são representados graficamente em livros didáticos e artigos científicos, destacando a importância de compreender os diferentes tipos de representações. Esse entendimento é essencial para que o aluno não crie falsos conceitos que podem se perpetuar ao longo de sua jornada acadêmica e profissional.

As figuras de *isosurfaces* são bastante comuns e podem dar a impressão de que o orbital é uma região espacial na qual o elétron estaria confinado. Entretanto, tais superfícies são construídas a partir do conjunto de pontos no espaço em que a densidade eletrônica assume um valor constante, o que representa regiões de igual probabilidade. Logo, elas não delimitam uma região para o elétron.

Orbitais são funções de onda usadas como amplitudes de probabilidade para o cálculo da densidade eletrônica. Enquanto as funções de onda podem assumir valores reais ou complexos, a densidade de probabilidade é sempre real e não negativa. A representação gráfica dos orbitais, por sua vez, emprega a parte real da função de onda ou combinações lineares que resultam em funções reais, como nos casos dos orbitais  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{xy}$ ,  $d_{xz}$ ,  $d_{yz}$ , entre outros.

Reforça-se, portanto, a necessidade de explorar o significado das diferentes representações dos orbitais, uma vez que elas permitem traduzir a linguagem matemática da mecânica quântica em uma forma acessível. Dada a complexidade de interpretação da mecânica quântica, é preciso cautela na abordagem de certos conceitos, principalmente em disciplinas introdutórias.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o financiamento do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq (Projeto 307572/2022-6), a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES (Código de Financiamento 001) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro – FAPERJ (Projeto E-26/210.376/2019).

## Referências Bibliográficas

1. Heisenberg, W.; Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik* **1925**, *33*, 879. [Crossref]
2. Schrödinger, E.; Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik* **1926**, *384*, 361. [Crossref]
3. Barbosa, A. G. H.; A Estranha e Contraditória Relação entre os Químicos e a Química Teórica. *Revista Virtual de Química* **2009**, *1*, 212. [Crossref]
4. Mulliken, R. S.; Spectroscopy, Molecular Orbitals, and Chemical Bonding. *Science* **1967**, *157*, 13. [Crossref] [PubMed]
5. Hoffmann, R.; Qualitative thinking in the age of modern computational chemistry—or what Lionel Salem knows. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* **1998**, *424*, 1. [Crossref]
6. Shahbazian, S.; Zahedi, M.; The role of observables and non-observables in chemistry: A critique of chemical language. *Foundations of Chemistry* **2006**, *8*, 37. [Crossref]
7. Sutcliffe, B. T.; Concluding remarks. *Faraday Discussions* **2006**, *135*, 503. [Crossref]
8. Mulliken, R. S.; Electronic Structures of Polyatomic Molecules and Valence. II. General Considerations. *Physical Review* **1932**, *41*, 49. [Crossref]
9. Krylov, A. I.; From orbitals to observables and back. *Journal of Chemical Physics* **2020**, *153*, 080901. [Crossref] [PubMed]
10. Kragh, H.; *Niels Bohr and the Quantum Atom: The Bohr Model of Atomic Structure 1913-1925*, Oxford University Press: Nova York, 2012.
11. Atkins, P. W.; De Paula, J.; Keeler, J.; *Physical Chemistry*, 11a. ed., Oxford University Press: Nova York, 2018.
12. Atkins, P.; Friedman, R.; *Molecular Quantum Mechanics*, 5a. ed., Oxford University Press: Nova York, 2011.
13. McQuarrie, D. A.; *Quantum Chemistry*, 2a. ed., University Science Books: Mill Valley, 2009.
14. Levine, I. N.; *Quantum Chemistry*, 7a. ed., Pearson: Nova Jersey, 2014.

15. Szabo, A.; Ostlund, N.; *Modern Quantum Chemistry*, McGraw-Hill: Nova York, 1996.
16. Atkins, P. W.; Jones, L.; *Chemical Principles: The Quest for Insight*, 5a. ed., W. H. Freeman: Nova York, 2009.
17. Kotz, J. C.; Treichel, P. M.; Townsend, J. R.; *Chemistry and Chemical Reactivity*, 8a. ed., Cengage Learning: Belmont, 2012.
18. Brown, T. L.; LeMay Jr., H. E.; Murphy, C. J.; Woodward, P. M.; Stoltzfus, M. W.; *Química: a Ciência Central*, 13a. ed., Pearson: São Paulo, 2015.
19. Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F.; Hangerman, M.; Em *Shriver and Atkin's inorganic chemistry*; 4a. ed., Bookman: Porto Alegre, 2008.
20. Huheey, J. E.; Keiter, E. A.; Keiter, R. L.; *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*, 4a. ed., Prentice Hall: Nova Jersey, 1997.
21. Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G.; *Inorganic Chemistry*, 5a. ed., Pearson: Nova York, 2018.
22. Miessler, G. L.; Fischer, P. J.; Tarr, D. A.; *Inorganic Chemistry*, 5a. ed., Pearson: Boston, 2014.
23. McMurry, J. E.; *Organic Chemistry*, 9a. ed., Cengage Learning: Stamford, 2015.
24. Braathen, C.; *Química Geral*, UFV: Viçosa, 2011.
25. Brady, E. J.; Humiston, G. E.; *Química Geral*, 2a. ed., LTC: Rio de Janeiro, 1986.
26. Russel, J. B.; *Química Geral*, 2a. ed., Makron: São Paulo, 1994.
27. Solomons, T. W. G.; Fryhle, C. B.; *Química Orgânica 1*, 10a. ed., LTC: Rio de Janeiro, 2012.
28. Bruice, P. Y.; *Química Orgânica*, 4a. ed., Pearson: São Paulo, 2006.
29. Lee, J. D.; *Química inorgânica não tão concisa*, Blucher: São Paulo, 1999.
30. Lima, M. M.; Silva, J. L. de P. B.; Orbital Atômico: Conceitos, Ontologia e Ensino. *Revista da Sociedade Brasileira de Ensino de Química* **2020**, *1*, e012001. [[Crossref](#)]
31. Labarca, M.; Lombardi, O.; Why orbitals do not exist? *Foundations of Chemistry* **2010**, *12*, 149. [[Crossref](#)]
32. Scerri, E. R.; Have Orbitals Really Been Observed? *Journal of Chemical Education* **2000**, *77*, 1492. [[Crossref](#)]
33. Mulder, P.; Are orbitals observable? *Hyle* **2011**, *17*, 24. [[Crossref](#)]
34. Q. Pham, B.; S. Gordon, M.; Pham, B. Q.; Gordon, M. S.; Can Orbitals Really Be Observed in Scanning Tunneling Microscopy Experiments? *Journal of Physical Chemistry A* **2017**, *121*, 4851. [[Crossref](#)] [[Pubmed](#)]
35. Truhlar, D. G.; Are molecular orbitals delocalized? *Journal of Chemical Education* **2012**, *89*, 573. [[Crossref](#)]
36. Truhlar, D. G.; Hiberty, P. C.; Shaik, S.; Gordon, M. S.; Danovich, D.; Orbitals and the Interpretation of Photoelectron Spectroscopy and (e,2e) Ionization Experiments. *Angewandte Chemie International Edition* **2019**, *58*, 12332. [[Crossref](#)]
37. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloe, F.; *Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts Tools, and Applications*, 2a. ed., Wiley-VCH: Weinheim, 2019.
38. Strocchi, F.; The physical principles of quantum mechanics. a critical review. *European Physical Journal Plus* **2012**, *127*, 1. [[Crossref](#)]
39. Nobel Prize; Max Born - Nobel Lecture: The Statistical Interpretations of Quantum Mechanics. [[Link](#)]
40. Mak, T. C. W.; Li, W. K.; Probability of Locating the Electron in a Hydrogen Atom. *Journal of Chemical Education* **2000**, *77*, 490. [[Crossref](#)]
41. Jackson, J. D.; *Classical Electrodynamics*, 3a. ed, Wiley: New Jersey, 1998.
42. Dunning, T. H.; Winter, N. W.; Formaldehyde Molecule in a Gaussian Basis: Electronic Density. *The Journal of Chemical Physics* **2003**, *55*, 3360. [[Crossref](#)]
43. Autschbach, J.; Orbitals: Some fiction and some facts. *Journal of Chemical Education* **2012**, *89*, 1032. [[Crossref](#)]
44. Hout, R. F.; Pietro, W. J.; Hehre, W. J.; Orbital photography. *Journal of Computational Chemistry* **1983**, *4*, 276. [[Crossref](#)]
45. Lorensen, W. E.; Cline, H. E.; Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm. *ACM SIGGRAPH Computer Graphics* **1987**, *21*, 163. [[Crossref](#)]
46. Lobo, P. H. F.; Arashiro, E.; Silva, A. C.; Pinheiro, C. F. S.; A smooth path to plot hydrogen atom via Monte Carlo method. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **2019**, *41*, e20190073. [[Crossref](#)]
47. Sullivan, C.; Kaszynski, A.; PyVista: 3D plotting and mesh analysis through a streamlined interface for the Visualization Toolkit (VTK). *Journal of Open Source Software* **2019**, *4*, 1450. [[Crossref](#)]
48. Feinberg, M. J.; Ruedenberg, K.; Paradoxical Role of the Kinetic-Energy Operator in the Formation of the Covalent Bond. *The Journal of Chemical Physics* **1971**, *54*, 1495. [[Crossref](#)]