

RESSALVA

Atendendo solicitação do(a) autor(a), o texto completo desta tese será disponibilizado somente a partir de 12/04/2025.



Universidade Estadual Paulista
“Júlio de Mesquita Filho”



Joana Souza Oliveira Galavotti

Orientador: Prof. Dr. Marco Aurélio Cebim

O Ensino da Teoria do Orbital Molecular em moléculas diatômicas: uma proposta para o Ensino Superior

Araraquara (SP)

2024

JOANA SOUZA OLIVEIRA GALAVOTTI

O ENSINO DA TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR EM MOLÉCULAS
DIATÔMICAS: UMA PROPOSTA PARA O ENSINO SUPERIOR

Tese apresentada ao Instituto de Química do Campus
Araraquara da Universidade Estadual Paulista “Júlio
de Mesquita Filho” como parte dos requisitos para
obtenção do grau de Doutorado em Química.

Orientador: Marco Aurélio Cebim

Araraquara (SP)

2024

G147e Galavotti, Joana Souza Oliveira
O Ensino da Teoria do Orbital Molecular em moléculas
diatômicas : uma proposta para o Ensino Superior /
Joana Souza Oliveira Galavotti. -- Araraquara, 2024
286 f. : il.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista
(UNESP), Instituto de Química, Araraquara
Orientador: Marco Aurélio Cebim

1. Inovações educacionais. 2. Ensino superior. 3.
Orbitais moleculares. 4. Modelagem. 5. Energia. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca
da Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara.
Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

IMPACTO POTENCIAL DESTA PESQUISA

Espera-se que o trabalho contribua de forma significativa para a área de Ensino em Química através de um produto educacional voltado para os alunos de graduação em Química. A elaboração da unidade didática com uso do Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) colabora em uma nova perspectiva de se tratar a TOM no Ensino Superior, ressaltando a importância dos modelos científicos e históricos. Consequentemente, presume-se que através dessa proposta a interpretação da ligação química seja facilitada e permita o entendimento de propriedades como diamagnetismo e paramagnetismo, estabilidade e fenômenos de estado excitado. Além disso, a análise da inversão dos orbitais moleculares $\sigma - \pi$ realizada, busca contribuir com um melhor entendimento dessa disposição energética dos orbitais em forma de tratamento de características descritivas dos orbitais de origem.

POTENCIAL IMPACT OF THIS RESEARCH

The work is expected to contribute significantly to the area of Chemistry Education through an educational product aimed at undergraduate Chemistry students. The elaboration of the didactic unit using the Modelling-based Teaching contributes to a new perspective of treating TOM in Higher Education, highlighting the importance of scientific and historical models. Consequently, it is assumed that through this proposal the interpretation of the chemical bond will be facilitated and allow the understanding of properties such as diamagnetism and paramagnetism, stability and excited state phenomena. Furthermore, the analysis of the inversion of the $\sigma - \pi$ molecular orbitals performed seeks to contribute to a better understanding of this energetic arrangement of the orbitals in the form of treatment of descriptive characteristics of the original orbitals.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: O ensino da Teoria do Orbital Molecular em moléculas diatômicas: uma proposta para o ensino superior

AUTORA: JOANA SOUZA OLIVEIRA GALAVOTTI

ORIENTADOR: MARCO AURELIO CEBIM

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Doutora em Química, pela Comissão Examinadora:

Documento assinado digitalmente
 **MARCO AURELIO CEBIM**
Data: 12/04/2024 14:47:31-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. MARCO AURELIO CEBIM (Participação Virtual)
Departamento de Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Prof. Dr. THIAGO ANTUNES SOUZA (Participação Virtual)
Departamento de Ciências Exatas e da Terra / Universidade Federal de São Paulo - UNIFESP - Diadema

Prof. Dr. GUSTAVO BIZARRIA GIBIN (Participação Virtual)
Departamento de Química e Bioquímica / Faculdade de Ciências e Tecnologia - UNESP - Presidente Prudente

Profa. Dra. PRESCILA GLAUCIA CHRISTIANINI BUZOLIN (Participação Virtual)
Departamento de Matemática / Faculdade de Ciências - UNESP - Bauru

Prof.ª Dr.ª MARIAN ROSALY DAVOLOS (Participação Virtual)
Departamento de Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Araraquara, 12 de abril de 2024

DADOS CURRICULARES

Formação acadêmica

2013-2016 Bacharelado em Química.

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, UNESP, Instituto de Química, Campus de Araraquara.

Trabalho de Conclusão de Curso: Perfil químico de mudas de *Inga marginata* usadas em reflorestamento.

Orientador: Professor Dr. Alberto José Cavaleiro.

2017-2019 Mestrado em Química.

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, UNESP, Instituto de Química, Campus de Araraquara.

Dissertação: Síntese, caracterização e avaliação de atividades biológicas de tiossemicarbazonas e semicarbazonas vanílicas e seus derivados de dinitrosilos de ferro.

Orientador: Professor Dr. José Clayston Melo Pereira.

2017-2022 Licenciatura em Química.

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, UNESP, Instituto de Química, Campus de Araraquara.

Trabalho de Conclusão de Curso: Proposta de uma sequência didática para abordagem da Eletronegatividade no Ensino Superior

Orientador: Professor Dr. Marco Aurélio Cebim.

Coorientador: Dr. Luís Felipe Bricks Bim.

Artigos completos publicados em periódicos

GALAVOTTI, J, S. O.; CEBIM, M. A.; BIM, L. F. B. Modelos e eletronegatividade: uma proposta de sequência didática para o Ensino de Química. **Química Nova**, v. 47, n. 2, 2024 (artigo de capa).

Trabalhos publicados em anais de eventos

PIRES, L. O.; BARROZO, S.; DOS SANTOS, L. C.; GOMES, P. C. F. L.; PINHEIRO, A. A.; AUGUSTUS, D.; PEREIRA, J. D. V.; GALAVOTTI, J. S. O.; SOARES, J. S.; BIOTTO, R. Museu de Ciências – Explorando o ambiente pelas redes sociais. *In: II SIMPÓSIO VIRTUAL DO MUSEU REGIONAL DE SÃO JOÃO DEL-REI: EDUCAÇÃO MUSEAL NO PANORAMA ATUAL*, 2021, São João del-Rei. **Anais do II Simpósio Virtual do Museu Regional de São João del-Rei**. São João del-Rei, 2021, v. 1, 8 p.

GALAVOTTI, J. S. O.; CEBIM, M. A.; BIM, L. F. B. Proposta de uma sequência didática para abordagem da Eletronegatividade no Ensino Superior. *In: XII ENCONTRO PAULISTA DE PESQUISA EM ENSINO DE QUÍMICA – “A PESQUISA NO ENSINO DE QUÍMICA E O PAPEL DA CIÊNCIA EM UMA SOCIEDADE MULTICULTURAL”*, v. 1, n. 12, 2023, Sertãozinho (SP) e Ribeirão Preto (SP). **Anais do XII Encontro Paulista de Pesquisa em Ensino de Química**. Sertãozinho e Ribeirão Preto: 2023, v. 1, n. 12.

GALAVOTTI, J. S. O.; CEBIM, M. A. O Ensino da Teoria do Orbital Molecular em moléculas diatômicas: uma proposta para o Ensino Superior. *In: XII ENCONTRO PAULISTA DE PESQUISA EM ENSINO DE QUÍMICA – “A PESQUISA NO ENSINO DE QUÍMICA E O PAPEL DA CIÊNCIA EM UMA SOCIEDADE MULTICULTURAL”*, v. 1, n. 12, 2023, Sertãozinho (SP) e Ribeirão Preto (SP). **Anais do XII Encontro Paulista de Pesquisa em Ensino de Química**. Sertãozinho e Ribeirão Preto: 2023, v. 1, n. 12.

À minha família por todo o apoio, orações e carinho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus, à Jesus, à Nossa Senhora Aparecida e a todos os espíritos amigos pelo acolhimento, força e luz em meu caminho.

Agradeço ao Professor Marco Aurélio por toda a orientação, apoio e confiança na realização deste trabalho e dos estágios que desenvolvemos, ambos importantes para meu crescimento pessoal e profissional. Agradeço também a oportunidade em aprender mais.

Agradeço aos amigos do grupo de Química Inorgânica pelas conversas, momentos de descontração e ensinamentos. Agradeço ao Vágner pelo apoio e conversas esclarecedoras e atenciosas para a minha formação e execução dessa etapa.

Agradeço à minha mãe, Creusa, que possui um papel fundamental na minha vida, pois sua dedicação acompanhou amor e cuidado e a sua força vem da mulher incrível que é. Mãe, agradeço também as orações que, sem dúvida alguma, acalmaram minha alma e iluminaram meu caminho.

Agradeço ao meu Amado Rodrigo por ser o meu melhor amigo, por possuir o abraço mais acolhedor e especial que pode existir e por despertar esse sentimento de vontade de viver esta vida e a continuidade dela ao seu lado. Agradeço também os conselhos que acalmam e orientam e os dias dedicados em meu auxílio.

Agradeço aos amigos queridos que a terra da laranja me proporcionou. Adrielle, Fernanda, Flávia, Francine, Leonardo, Luís, Melany, Mirian, Patrícia, Raul, Rodolpho, Rodrigo Cesar, Thainá e Toshifumi, pessoas que tanto me apoiaram por meio de atitudes, conversas e cafés da tarde que tornam a rotina estudantil mais leve. Com afeto, agradeço a minha irmã do coração Thaís por toda a amizade, o compartilhamento de risadas, dores e atrapalhadas que só nós entendemos. Com carinho, agradeço ao Catu (Thiago) pelo acolhimento em momento difícil, pela amizade em todos esses anos e com seu jeito único proporcionar risadas e fofocas que aliviaram as longas noites.

Agradeço ao Instituto de Química por ser esse lugar que, com o passar do tempo, torna-se um lar. Agradeço também pela infraestrutura. Agradeço aos funcionários por todo o apoio. Em especial aos amigos queridos da Biblioteca que me acompanham desde o início; a amizade e carinho de Valéria e Ana. Também agradeço a Ana Paula, Denise, Isabel, João, Juliana, Lígia, Rafael, Robson, Rogério e Wennia. Aos queridos Lucineia e Paul.

Agradeço a CAPES, CNPq e Fapesp por toda colaboração.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de financiamento 001.

RESUMO

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) é um modelo científico de ligação química que surgiu na década de 1920 assim como a Teoria da Ligação de Valência (TLV), sendo baseadas na mecânica quântica. Diversos cientistas colaboraram para o surgimento desse modelo com destaque para Robert Mulliken, Friedrich Hund, John Lennard-Jones e Edward Condon. Embora se apresente como um modelo científico satisfatório para a explicação da formação de ligações, foi observado através de um levantamento bibliográfico que a TOM é pouco explorada como temática de pesquisa na área de Ensino em Química mesmo que conste no conteúdo dos cursos de graduação. Concomitantemente, o estudo da TOM implica no conhecimento dos diagramas de orbitais moleculares organizados a partir da energia potencial. A observação dos diagramas para espécies diatômicas homonucleares formadas por elementos químicos do segundo período da tabela periódica indica uma inversão da posição dos orbitais moleculares entre as espécies dinitrogênio e di-oxigênio, sendo proposto uma relação entre esse comportamento com as energias de orbital utilizadas por Leland Allen na determinação da eletronegatividade. Ademais, a TOM permite estabelecer conclusões sobre a existência de moléculas com base na ordem de ligação, algo utilizado de maneira a sugerir associações dessa e de características do átomo isolado para a proposição da energia de dissociação de ligação em moléculas diatômicas homonucleares como propriedade periódica dos elementos químicos. Dessa maneira, o trabalho é composto por duas partes: a primeira com a elaboração e aplicação de uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM) sobre a TOM em uma turma do primeiro ano do curso de Bacharelado em Química no Instituto de Química da UNESP. Como abordagem metodológica é utilizado o Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) que, dentre seus objetivos, busca desenvolver as noções sobre a natureza, a abrangência e limitação de um modelo científico, estimulando ações de avaliação, criação e reformulação. Ao longo da UDM, estratégias didáticas foram planejadas com vias de atender ao tema e ao público-alvo. Os modelos expressos pelos alunos nas atividades de modelagem foram examinados pela Análise de Conteúdo de Laurence Bardin, revelando superações das tratativas macroscópicas para microscópicas. A segunda parte consiste nas correlações da energia de dissociação de moléculas diatômicas homonucleares como propriedade periódica de maneira gráfica e equacional a partir da adoção de características das famílias da tabela periódica, como o número de elétrons desemparelhados, a ordem de ligação, o estabelecimento de ligações pi, entre outros. Ainda com a intencionalidade de aprofundamento das relações a serem estabelecidas com base em aspectos dos diagramas de orbitais moleculares, sugere-se tratar a inversão sigma-pi por meio da energia do orbital utilizada por Allen na descrição das energias de configuração. Dessa forma, espera-se contribuir com a área de Ensino de Química por meio da UDM planejada sobre a TOM, tendo sido observado um movimento de apropriação da Ciência e avanços significativos quanto as visões fragmentadas dos modelos científicos da ligação química. Quanto a energia de dissociação obteve-se correlações entre os valores descritos e experimentais, inferindo relações sob o viés de propriedades do átomo isolado. Por fim, a interpretação da inversão sigma-pi sob a ótica da energia do orbital permitiu uma clara representação gráfica desse comportamento, enriquecendo a compreensão do fenômeno.

Palavras-chave: Teoria do Orbital Molecular; Unidade Didática Multiestratégica; Ensino Fundamentado em Modelagem; Energia de dissociação de ligação; Energia orbital.

ABSTRACT

The Molecular Orbital Theory (MOT) is a scientific model of chemical bonding that emerged in the 1920s, as well as the Valence Bond Theory (VBT), both of which are based on quantum mechanics. Several scientists contributed to the emergence of this model, notably Robert Mulliken, Friedrich Hund, John Lennard-Jones, and Edward Condon. Although it presents itself as a satisfactory scientific model for explaining the formation of connections, it was observed through a bibliographic survey that MOT is little explored as a research topic in the area of Chemistry Education even though it is included in the content of undergraduate courses. At the same time, the study of MOT implies knowledge of molecular orbital diagrams organized based on potential energy. Observation of the diagrams for homonuclear diatomic species formed by chemical elements from the second period of the periodic table indicates an inversion of the position of the molecular orbitals between the dinitrogen and di-oxygen species, so it was proposed a correlation between the orbital energy used by Leland Allen to the determination of the electronegativity. Furthermore, MOT allows conclusions to be drawn about the existence of molecules based on the bond order, something used in order to suggest associations of this and characteristics of the isolated atom to propose the bond dissociation energy in homonuclear diatomic molecules as a periodic property of chemical elements. Thus, the work is composed of two parts: the elaboration and application of a Multi-strategic Didactic Unit (MDU) on MOT in a first-year class of the Bachelor's degree in Chemistry at the Chemistry Institute of UNESP. As a methodological approach, Teaching Based on Modelling is used, which, among its objectives, seeks to develop notions about the nature, scope, and limitations of a scientific model, stimulating actions of evaluation, creation, and reformulation. Throughout the MDU, teaching strategies were planned with ways to meet the theme and target audience. The models expressed by students in modeling activities were examined using Laurence Bardin's Content Analysis, revealing over comings from macroscopic to microscopic approaches. The second part consists of the correlations of the dissociation energy of homonuclear diatomic molecules as a periodic property in a graphical and equational way based on the adoption of characteristics of the families of the periodic table, such as the number of unpaired electrons, the bond order, the establishment of bonds π , among others. Still with the intention of deepening the relationships to be established based on aspects of the molecular orbital diagrams, it is suggested to treat the sigma- π inversion through the orbital energy used by Allen in the description of the configuration energies. In this way, it is expected to contribute to the area of Chemistry Teaching through the MDU planned on MOT, having observed a movement towards the appropriation of Science and significant advances regarding the fragmented views of scientific models of chemical bonding. Regarding dissociation energy, correlations were obtained between the described and experimental values, inferring relationships based on the properties of the isolated atom. Finally, the interpretation of the sigma- π inversion from the perspective of orbital energy allowed a clear graphical representation of this behavior, enriching the understanding of the phenomenon.

Keywords: Molecular Orbital Theory; Multi-strategic Didactic Unit; Teaching Based on Modelling; Bond dissociation energy; Orbital energy.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Gilbert Newton Lewis.....	35
Figura 2 - Representação do modelo do átomo cúbico.	36
Figura 3 - Representação da ligação química por pontos.....	37
Figura 4 - Ilustração do fenômeno de ressonância em uma molécula diatômica heteronuclear AB.....	43
Figura 5 - Representação da sobreposição de orbitais atômicos em relação a energia potencial.	44
Figura 6 - Ilustração do modelo de ressonância para a molécula CH ₄	45
Figura 7 - Friedrich Hund.....	47
Figura 8 - Robert Sanderson Mulliken.	48
Figura 9 - John Edward Lennard-Jones.....	49
Figura 10 - Edward Condon.	50
Figura 11 - Representações gráficas do fenômeno de interferência construtiva entre duas funções de onda genéricas - $\Psi_{1s}(A)$ e $\Psi_{1s}(B)$ - representadas pela parte radial (R_{nl}) a) Aproximação dos orbitais s. b) Aumento da interação entre as funções de onda, em fase, características dos orbitais s. c) Interferência construtiva e aumento da densidade nuclear entre as funções de onda representativas da parte radial.	52
Figura 12 - Representação gráfica da redução de densidade nuclear entre os átomos A e B. para duas funções de onda genéricas - $\Psi_{1s}(A)$ e $\Psi_{1s}(B)$ - representadas pela parte radial (R_{nl}) a) Aproximação dos orbitais s e formação de plano nodal b) Formação de um plano nodal internuclear a partir da superposição de orbitais fora de fase c) Interferência construtiva entre as funções de onda representativas da parte radial.	53
Figura 13 - Representação do diagrama de orbitais moleculares para uma entidade molecular diatômica.	56
Figura 14 - Diagrama de orbitais moleculares para H ₂	57
Figura 15 - Representação gráfica da sobreposição de orbitais.	58
Figura 16 - Representação gráfica de uma ligação sigma a partir de dois orbitais s.....	59
Figura 17 - Representação gráfica de uma ligação pi a partir de dois orbitais p.....	59
Figura 18 - Exemplos representativos de combinações não ligantes entre orbitais.	60
Figura 19 - Designação dos orbitais através do sistema g - u.	61
Figura 20 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para He ₂	62

Figura 21 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para Li ₂	64
Figura 22 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para Be ₂	65
Figura 23 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para B ₂	66
Figura 24 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para C ₂	67
Figura 25 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para N ₂	71
Figura 26 - Níveis de energia dos orbitais atômicos para as moléculas diatômicas do segundo período da tabela periódica.	72
Figura 27 - Interações em um diagrama de orbitais moleculares a) Sem inversão σ - π . b) Com inversão σ - π	73
Figura 28 - Ilustração representativa dos orbitais moleculares HOMO e LUMO.	75
Figura 29 - Representação do diagrama de orbitais moleculares para O ₂	77
Figura 30 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para F ₂	79
Figura 31 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para Ne ₂	80
Figura 32 - Ilustração geral do experimento de espectroscopia fotoeletrônica.	81
Figura 33 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para uma molécula genérica AB - espécie diatômica heteronuclear.	83
Figura 34 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para HF.	84
Figura 35 - Representação do óxido nítrico.	84
Figura 36 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para NO.	85
Figura 37 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para CO.	87
Figura 38 - Relação do χ_{spec} com o período da tabela periódica.	96
Figura 39 - Relação χ_{spec} com os grupos da tabela periódica.	97
Figura 40 - Comparação entre os modelos de eletronegatividade de Allen, Pauling e Allred-Rochow.	98
Figura 41 - Triângulo de van Arkel-Ketelaar.	100
Figura 42 - Representação gráfica da eletronegatividade dos elementos químicos segundo a escala de Allen.	101
Figura 43 - Organização da UDM.	108
Figura 44 - Esquematização de relações entre as etapas da modelagem.	119
Figura 45 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 1.	147
Figura 46 - Representação através de reação química para a molécula di-hidrogênio do Grupo 2.	148
Figura 47 - Representação através de reação química para a molécula di-hidrogênio do Grupo 3.	149

Figura 48 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 4.....	150
Figura 49 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 4.....	150
Figura 50 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 5.....	152
Figura 51 - Representação gráfica para o átomo hélio do Grupo 5.....	152
Figura 52 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 6.....	154
Figura 53 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 7.....	155
Figura 54 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 9.....	156
Figura 55 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 9.....	157
Figura 56 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 10.....	158
Figura 57 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio e di-hélio do Grupo 11. .	159
Figura 58 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio e di-hélio do Grupo 1 – segundo modelo.....	161
Figura 59 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 3 – segundo modelo.	162
Figura 60 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 3 – segundo modelo.	163
Figura 61 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 4 – segundo modelo.	164
Figura 62 - Representação gráfica para a molécula di-hélio e di-hidrogênio do Grupo 4 – segundo modelo.....	164
Figura 63 - Representação gráfica para as moléculas do Grupo 7. a) Di-hidrogênio. b) Di-hélio.	166
Figura 64 - Representação gráfica para as moléculas di-hélio e di-hidrogênio do Grupo 6 – segundo modelo.....	167
Figura 65 -Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 7 – segundo modelo.	168
Figura 66 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 8 – segundo modelo.	169
Figura 67 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 8 – segundo modelo.	169
Figura 68 - Representação gráfica para as moléculas di-hidrogênio e di-hélio do Grupo 9 – segundo modelo.....	170
Figura 69 - Representação gráfica para a molécula de di-hélio e di-hidrogênio do Grupo 10 – segundo modelo.....	171
Figura 70 - Representação gráfica corrigida para o hélio do Grupo 11 – segundo modelo..	172

Figura 71 - Representação gráfica da situação detergente-água do Grupo 1.	176
Figura 72 - Representação gráfica para a discussão do di-oxigênio do Grupo 4.	179
Figura 73 - Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O ₂ e N ₂ do Grupo 5.	180
Figura 74 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de N ₂ do Grupo 8.	182
Figura 75 - Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O ₂ do Grupo 9.	183
Figura 76 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O ₂ e N ₂ do Grupo 10.	184
Figura 77 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O ₂ do Grupo 1 – segundo momento.	187
Figura 78 - Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O ₂ e N ₂ do Grupo 2.	188
Figura 79 - Representação do esquema do Grupo 4 para a relação bolha de ar e ímã.	190
Figura 80 - Representação do esquema do Grupo 4 para a relação bolha de gás oxigênio e ímã.	190
Figura 81 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de N ₂ e O ₂ do Grupo 6 – segundo momento.	192
Figura 82 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O ₂ do Grupo 8 – segundo momento.	193
Figura 83 - Esquematização das categorias para o di-hidrogênio – primeiro modelo.	196
Figura 84 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hidrogênio – primeiro modelo.	196
Figura 85 - Esquematização das categorias para o di-hélio – primeiro modelo.	199
Figura 86 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hélio – primeiro modelo.	199
Figura 87 - Esquematização das categorias para o di-hidrogênio – segundo modelo.	201
Figura 88 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hidrogênio – segundo modelo.	202
Figura 89 - Esquematização das categorias para o di-hélio – segundo modelo.	203
Figura 90 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hélio – segundo modelo.	203

Figura 91 – Esquematização das categorias surgidas para o dia- e paramagnetismo das moléculas N ₂ e O ₂ .	205
Figura 92 - Representação gráfica comparativa entre versões da UDM.	212
Figura 93 - Energia de dissociação de ligação (BDE) para as moléculas diatômicas homonucleares.	213
Figura 94 - BDE em função do número atômico para a família dos metais alcalinos.	215
Figura 95 - Valores experimentais de BDE e valores calculados de BDE através da contribuição principal para a família do boro.	219
Figura 96 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família do carbono.	222
Figura 97 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família dos pnictogênios (15).	223
Figura 98 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família dos calcogênios (16).	225
Figura 99 - BDE experimental e BDE calculada: BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família dos halogênios (17).	227
Figura 100 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de polarização para a família dos metais alcalino terrosos (2).	229
Figura 101 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de polarização para a família dos gases nobres (18).	230
Figura 102 - Variação em energia das tríades do segundo período da tabela periódica.	232

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Primeira seção da UDM: Contexto da intervenção didático-pedagógica.	109
Quadro 2 - Segunda seção da UDM: Análise didático-epistemológica.	111
Quadro 3 - Terceira seção da UDM: Análise didático-pedagógica.	114
Quadro 4 - Quarta seção da UDM: Abordagem metodológica.	115
Quadro 5 - Quinta seção da UDM: Título, objetivos de aprendizagem e sequências didáticas.	116
Quadro 6 – Últimas tarefas da UDM: Seleção das estratégias didáticas e das estratégias de avaliação.	117
Quadro 7 - Recorte da seção "Análise Científico-Epistemológica" da UDM.	133
Quadro 8 - Recorte da seção "Análise Didático-Pedagógica" da UDM.	134
Quadro 9 - Quadro resumo da elaboração da UDM "Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas."	137
Quadro 10 - Instrumento de análise de interrelação entre elementos da UDM.	208
Quadro 11 - Primeira interrelação entre elementos da UDM para a primeira versão.	209
Quadro 12 - Última interrelação entre elementos para a última versão da UDM.	211

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BDE	Energia de dissociação de ligação
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CLOA	Combinação Linear dos Orbitais Atômicos
EFM	Ensino Fundamentado em Modelagem
EQ	Ensino de Química
ES	Ensino Superior
HOMO	Orbital molecular ocupado de maior energia
IQ	Instituto de Química
LUMO	Orbital molecular desocupado de menor energia
OL	Ordem de ligação
OM	Orbital molecular
OMAL	Orbital molecular antiligante
OML	Orbital molecular ligante
OMNL	Orbital molecular não ligante
TLV	Teoria da Ligação de Valência
TOM	Teoria do Orbital Molecular
UDM	Unidade Didática Multiestratégica
UNESP	Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Hipótese de pesquisa.....	22
1.2	Pergunta da pesquisa.....	22
1.3	Objetivos	23
2	LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO	24
3	JUSTIFICATIVA	30
4	REFERENCIAL TEÓRICO.....	31
4.1	Anos de 1900 a 1910	31
4.2	Anos de 1911 a 1920	34
4.3	Anos de 1921 a 1930	38
4.4	A Teoria do Orbital Molecular (TOM).....	51
4.4.1	Nomenclatura dos orbitais moleculares	60
4.4.2	Diagramas de orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares do segundo período da tabela periódica – He ₂ a N ₂	61
4.4.3	Hibridização de orbitais	72
4.4.4	Orbitais HOMO e LUMO	74
4.4.5	Diagramas de orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares do segundo período da tabela periódica – O ₂ , F ₂ e Ne ₂	77
4.4.6	Espectroscopia de fotoelétrons.....	80
4.4.7	Diagramas de orbitais moleculares para moléculas diatômicas heteronucleares do segundo período da tabela periódica	82
4.5	Teoria do Orbital Molecular e Eletronegatividade	87
4.5.1	A escala de eletronegatividade para Pauling (1932)	88
4.5.2	A escala de eletronegatividade para Mulliken (1934).....	92
4.5.3	A escala de eletronegatividade para Allred e Rochow (1958)	93
4.5.4	A escala de eletronegatividade para Allen (1989)	94
4.6	REFERENCIAL TEÓRICO-METODOLÓGICO	101
5	PERCURSO METODOLÓGICO	105
5.1	Unidade Didática Multiestratégica: uma forma de planejar	107
5.2	Considerações sobre os modelos e o Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) ..	118
5.3	Natureza da pesquisa	121
5.3.1	Desenho de pesquisa	121
5.4	Análise de conteúdo.....	122

6 RESULTADOS	129
6.1 Parte I.....	131
6.1.1 Elaboração e aplicação da Unidade Didática Multiestratégica (UDM)	131
6.1.2 Transcrições dos modelos expressos pelos grupos	147
6.1.3 Transcrições e comentários: situação do paramagnetismo e diamagnetismo	174
6.1.4 Categorias por análise de conteúdo	195
6.2 Parte II.....	213
7 CONSIDERAÇÕES FINAIS	234
REFERÊNCIAS	237
APÊNDICE	242

1 INTRODUÇÃO

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) é um modelo científico de ligação química com fundamentos da mecânica quântica, sendo importante para o estudo espectroscópico de moléculas. Datada em meados da década de 1920, a TOM amplia o entendimento da ligação química para além do compartilhamento de pares eletrônicos (Pereira *et al.*, 2017). De acordo com a TOM, os elétrons ocupam os orbitais moleculares e, conseqüentemente, há o pertencimento dessas entidades por toda a estrutura molecular (Barros, 1992). Essa distribuição se vincula ao surgimento de funções de onda distribuídas por todo um sistema (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Dentre os principais responsáveis pela elaboração da TOM estão Robert Mulliken, Friedrich Hund, John Lennard-Jones e Edward Condon (Murrell, 2011). Devido as contribuições desses cientistas, a TOM atua como uma ferramenta que auxilia na previsão de estruturas estáveis, propriedades físicas, reatividade de espécies químicas e comportamento magnético de materiais (Murrell, 2011).

Sendo uma importante ferramenta para avaliação de ligações químicas e sistemas moleculares, a TOM compõem a grade curricular dos cursos de graduação em Química, seja por meio das disciplinas da área de Química Geral, Química Orgânica ou Inorgânica. No Instituto de Química da Unesp de Araraquara, os discentes têm um primeiro contato com esse modelo no primeiro ano do curso de Bacharelado em Química na disciplina de Química Fundamental (antiga Química Geral) em meio ao estudo das ligações químicas. Como a TOM é relevante para os estudos espectroscópicos, é de se esperar que haja uma quantidade considerável de estudos em literatura que a envolvam junto às investigações de cunho molecular, mas e quanto ao Ensino desse modelo de ligação química?

Para compreender o que vem sendo trabalhado com a TOM junto ao campo do Ensino de Química, foi feito um levantamento bibliográfico em bases de dados e revistas nacionais. Desse levantamento percebe-se que há uma forte presença de trabalhos voltados ao desenvolvimento e/ou aproveitamento de programas computacionais e aplicativos para visualização e comparação de representações gráficas dos diagramas de orbitais moleculares. Há registros de concepções alternativas vinculadas aos aspectos da mecânica quântica, principalmente, em literatura estrangeira. Todavia, não há menção de trabalhos nacionais que tratem o Ensino da TOM como um modelo que dialogue com as outras teorias de ligação química. Nesse contexto, o presente trabalho sugere uma abordagem para a TOM como um modelo científico de ligação química. A abordagem é organizada por meio de uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM) estruturada para os anos iniciais dos cursos de graduação em

Química. Nessa sequência propõe-se o uso do Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) como metodologia de ensino. Com isso, se espera fornecer um material educacional que reúna diferentes estratégias didáticas e possa contribuir com a literatura da área. Além da elaboração, há a aplicação das aulas fundamentadas na UDM para uma turma do primeiro ano de graduação do curso Bacharelado em Química do Instituto de Química da UNESP de Araraquara. Durante a aplicação dessas aulas, haverá atividades de modelagem em momentos apropriados acerca do conteúdo. Com o intuito de verificar as potencialidades do Ensino da Teoria do Orbital Molecular com base em uma UDM orientada pelo Ensino Fundamentado em Modelagem, serão analisados os modelos expressos pelos alunos nas atividades de modelagem através da Análise de Conteúdo de Bardin. Por fim, diários de aula compõem uma leitura geral sobre essa intervenção em sala de aula.

Em paralelo com a ideia de trazer a TOM em um contexto educacional, há uma parte deste trabalho dedicada à pesquisa da disposição energética dos orbitais nos diagramas de orbitais moleculares para espécies diatômicas homo- e heteronucleares do primeiro e segundo período da tabela periódica. Os diagramas de orbitais moleculares constituem-se como um relevante aspecto teórico e simbólico da teoria, sendo modelos vastamente representados em materiais de estudo da Química. Ao analisar os diagramas de espécies ditas leves como B_2 , C_2 e N_2 comparadas com as chamadas pesadas como O_2 e F_2 , se nota uma inversão entre os orbitais moleculares do tipo sigma (σ) e pi (π). Há alguma forma de explicar essa inversão tão comumente encontrada em livros didáticos para a graduação? Para responder esse questionamento, o trabalho usufrui da eletronegatividade proposta por Leland Allen na busca de um modelo que se coloque como uma boa tratativa da situação descrita.

Partindo dos diagramas de orbitais moleculares propõe-se ainda uma descrição da energia de dissociação de moléculas diatômicas homonucleares formadas por elementos químicos do primeiro e segundo período da tabela periódica em relação a propriedades do átomo isolado. Com isso, sugere-se correlações entre parâmetros de propriedades como o número de elétrons desemparelhados, o número de nós radiais, o número quântico principal, entre outras, em relação ao comportamento da energia de dissociação de moléculas diatômicas para as famílias dos elementos químicos representativos. Essa proposição vincula-se ao aprofundamento do estudo de informações trazidas pelos diagramas de orbitais moleculares. Consequentemente, novos modelos são apresentados.

Dessa forma, se espera contribuir com a área da Química a partir das proposições descritas, sendo uma delas a elaboração e aplicação de uma UDM amparada no EFM o que culmina na produção de um material educativo direcionado aos anos iniciais dos cursos de

graduação em Química. Ademais, se propõe o desenvolvimento de uma correlação entre a posição em energia das configurações de valência dos átomos representativos junto aos diagramas de orbitais moleculares como tratativa da inversão (σ) – pi (π) ampliando discussões acerca desse tema. Por fim, os diagramas de orbitais moleculares inspiraram observações que motivaram a descrição de correspondências entre a energia de dissociação de moléculas e propriedades do átomo isolado.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O trabalho voltado à Teoria do Orbital Molecular (TOM) foi firmado sob duas frentes: uma para a área de Ensino e outra para o estudo químico dos diagramas de orbitais moleculares. Isso foi possível devido ao questionamento de quais são as temáticas do Ensino de Química, para o Ensino Superior, mais estudadas em pesquisas de âmbito nacional. Desse questionamento observou-se áreas com maior quantidade de trabalhos publicados como, por exemplo, as pesquisas direcionadas a experimentação em Química e a metodologia CTSA. Todavia não foram encontrados trabalhos voltados à TOM para os cursos de nível superior. Dando continuidade à primeira indagação, questionou-se quais são as produções direcionadas ao Ensino das Ligações Químicas. Dessa pergunta, percebeu-se que, embora existam materiais de análise de livros didáticos e de concepções alternativas sobre a temática, ainda há carência de se falar sobre a TOM. Destaca-se que parte considerável dos trabalhos encontrados para o Ensino de ligações químicas é orientado para a educação básica. Logo, há um campo pouco explorado em relação à temática escolhida, como também ao que tange o público para qual se baseiam os estudos nacionais.

A TOM atua como um modelo científico de ligações químicas, sendo abordada em sala de aula desde os primeiros anos dos cursos de graduação em Química no IQ – UNESP. Com base no levantamento bibliográfico e no entendimento de que o tema apresenta relevância para a compreensão da ligação química, foi sugerida a elaboração e aplicação de uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM) para a TOM. A UDM compõe um planejamento orientado, auxiliando o docente na construção coerente de suas aulas quanto ao tema, conteúdo, objetivos, recursos e instrumentos de avaliação. Como metodologia de ensino foi selecionado o Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM).

O EFM teve ampla participação em todo o trabalho, tanto na parte voltada ao Ensino de Química quanto na proposta Química. Na abordagem Química foram discutidos aspectos associados com os diagramas de orbitais moleculares e as propriedades do átomo isolado. A observação da inversão σ - π , presente entre as tríades B_2 , C_2 e N_2 em relação a O_2 , F_2 e Ne_2 , junto a energia orbital e a descrição das energias de dissociação de moléculas diatômicas homonucleares formadas pelos elementos químicos do segundo período da tabela periódica constituem as discussões presentes na parte Química. A escolha dessas duas frentes de abordagem culmina em direção a TOM. Essas frentes, unidas pelo aprofundamento da TOM, entrelaçam o intuito de estudo e apresentação de um modelo científico importante para a tratativa das ligações químicas.

Tratando-se da perspectiva de disposição energética dos orbitais moleculares em relação a inversão σ - π , o trabalho investigou que uma maneira de demonstrar, quantitativamente, essa distinção consiste na variação de energia a partir da quantidade de elétrons em orbitais do tipo s e p considerando a energia desses orbitais descritas na obra de Mann, Meek e Allen (2000). Ao traçar essas variações de B_2 a Ne_2 percebe-se que há um aumento significativo de variação em energia do dinitrogênio ao di-oxigênio. Dessa determinação quantitativa originou-se um modelo matemático e outro visual para a caracterização do fenômeno da inversão. Esses modelos são frutos das considerações de todo um processo em função dos dados experimentais disponíveis e da discussão teórica do conteúdo.

As energias de dissociação das famílias de elementos representativos foram analisadas seguindo a quantidade de elétrons desemparelhados, as configurações dos números quânticos n e l e as devidas correções e associações de simetria σ ou π , resultando em aproximações coerentes dos dados calculados e medidas experimentais. Essa análise permitiu a modelagem a partir de propriedades do átomo isolado, como também de características advindas da TOM para determinadas entidades químicas. Assim, a ordem de ligação e o número de elétrons desemparelhados, por exemplo, deu início a uma série de tratativas que resultaram em modelos matemáticos equacionais para a descrição do comportamento periódico da energia de dissociação de moléculas dos elementos químicos representativos.

Quanto ao Ensino da TOM, a adoção da UDM como caminho de planejamento trouxe a organização de diferentes estratégias didáticas e um olhar necessário para maneiras diferentes de diagnosticar o entendimento dos estudantes. O material produzido para turmas iniciais do curso de graduação em Bacharelado em Química pode contribuir com a área de Ensino em Química ao trazer uma maneira dinâmica de lidar com o assunto, além de valorizar personagens fundadores desse modelo científico.

As atividades de modelagem sugeridas foram acompanhadas por análise de conteúdo dos materiais escritos produzidos pelos estudantes, o que indicou mudanças na percepção da ligação química. Da teoria do octeto a diagramas de orbitais moleculares, notou-se que houve significativa mudança de interpretação da ligação química. Isso inclui análises realizadas pelos alunos sobre a seleção de quais teorias de ligação química são ferramentas condizentes com determinadas situações. Logo, partiu dos estudantes a transposição dos modelos. Das supostas ligações químicas entre ímãs e gases ao comportamento magnético de moléculas, discutiu-se de maneira ativa o paramagnetismo e o diamagnetismo das moléculas. Nesse contexto, os diagramas, o posicionamento do elétron em relação aos orbitais moleculares HOMO e LUMO, a atração do campo magnético sob os gases, o comportamento do átomo como um ímã, a origem

dos gases O_2 e N_2 e até mesmo a expiração e respiração humana foram assuntos detalhados em aula a partir da modelagem e do vídeo produzido.

Consequentemente, a modelagem promoveu a discussão e o questionamento científico. Os estudantes passaram por momentos de transição entre a visão macroscópica de fenômenos científicos para a tratativa microscópica. Com isso, desafios foram superados a partir da modelagem como instrumento de se pensar sobre a Ciência concomitante ao fazer Ciência. Os “por quês” de cada indivíduo geraram movimento na tratativa da TOM, instigando o entendimento de como esse modelo científico funciona. Além disso, os modos de interação da TOM com os estudantes foram planejados para servir atividades avaliativas individuais e em equipe, promovendo além das construções de diagramas e cálculos de ordem de ligação, a relação de características tão especiais como os orbitais de fronteira e as propriedades periódicas e a valorização do contexto histórico de sua formação presente desde a elaboração de todo o material educacional. Dessa maneira, espera-se que o trabalho contribua em aspecto químico e educacional ao tratar a TOM como um modelo científico de ligação química, valorizando seus atributos e desvelando possíveis trajetórias de descrição da disposição energética dos orbitais moleculares.

REFERÊNCIAS

- ALLEN, L. C. Electronegativity is the average one-electron energy of the valence-shell electrons in ground-state free atoms. **Journal American Chemical Society**, v. 111, n. 25, p. 9003-9014, 1989.
- ALLEN, L. C.; MANN, J. B.; MEEK, T. L. Configuration energies of the main group elements. **Journal American Chemical Society**, v. 122, n. 12, p. 2780-2783, 2000.
- ALLRED, A. L.; ROCHOW, E. G. A scale of eletronegativity based on electrostatic force. **Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry**, v. 5, p. 264-268, 1958.
- ARAÚJO NETO, W. N. A noção clássica de valência e o limiar da representação estrutural. **Química Nova na Escola**, n. 7, p. 13-24, 2007.
- ATKINS, P.; JONES, L. **Princípios de Química**: questionando a vida moderna e o meio ambiente. Porto Alegre: Bookman, 2012. 1055 p.
- BACHELARD, G. **A formação do espírito científico**. 1 ed. Rio de Janeiro: Contraponto Editora, 1996, 309 p.
- BARDIN, L. **Análise de Conteúdo**: 1. ed. São Paulo: Almedina, 2016, 280 p.
- BARRETO, R. L.; CORREIA, C. R. D. Óxido nítrico: propriedades e potenciais usos terapêuticos. **Química Nova**, v. 28, n. 6, p. 1046-1054, 2005.
- BARROS, H. L. C. **Química Inorgânica**; uma introdução. Belo Horizonte: Ed. UFMG, 1992. 474 p.
- BRANDÃO, C. R.; RODRIGUES, M. C. A pesquisa participante: um momento da educação popular. **Revista Educação Popular**, v. 6, p. 51-62, 2007.
- BRASIL. Conselho Nacional de Educação. Resolução CNE/CP nº 1303, de 7 de dezembro de 2001. Diretrizes Curriculares Nacionais para os Cursos de Química. **Diário Oficial da República Federativa do Brasil**: Seção 1, Brasília, DF, p. 25, 2001.
- BEGO, A. M. A implementação de unidades didáticas multiestratégicas na formação inicial de professores de Química. **Coleção Textos FCC** (Online), v. 50, p. 55-72, 2016.
- BEGO, A. M.; SGARBOSA, E. C. Transitando entre o planejamento teórico e a realidade do cotidiano escolar: vivências, desafios e aprendizados. In: COLVARA, L. D., OLIVEIRA, J. B. B. (org.). **Metodologias de Ensino e a Apropriação de Conhecimento pelos Alunos**. 1ed. São Paulo: Cultura Acadêmica, 2016, v. 2, p. 8-32.
- BERTIN, M. C.; PIMENTEL, B. M.; POMPEIA, P. J. Formalismo de Hamilton-Jacobi à lá Carathéodory. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 29, n. 3, p. 393-403, 2007.
- BROWN, T.L; LEMAY, H. E.; BURSTEN, B. E.; MURPHY, C. J.; WOODWARD, P. M.; STOLTZFUZ, M. W. **Química**: a ciência central: 13ª Ed. São Paulo: Ed. Pearson, 2016. 1216 p.
- CALLEGARIO, L. J.; HYGINO, C. B.; ALVES, V. L. O.; LUNA, F. L.; LINHARES, M. P. A História da Ciência no Ensino de Química: uma revisão. **Revista Virtual de Química**, v. 7, n. 3, p. 977-991, 2015.
- CHENG, J *et al.* Selective control of photoassociation of alkaline earth dimers: a theoretical study. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 119, n. 24, p. e26027, 2019.
- DE BROGLIE, L. **Um itinéraire scientifique**. Paris: Ed. La Découverte, 1987. 218 p.

- DENZIN, N. K.; LINCOLN, Y. S. Introdução: a disciplina e a prática da pesquisa qualitativa. *In: DENZIN, N. K. e LINCOLN, Y. S. (Orgs.). O planejamento da pesquisa qualitativa: teorias e abordagens*. 2. ed. Porto Alegre: Artmed, 2006. p. 15-41.
- FARIAS, I. M. S.; SALES, J. O. C. B.; BRAGA, M. M. S. C.; FRANÇA, M. S. L. M. **Didática e Docência**: aprendendo a profissão. 1ª Ed. Fortaleza: Liber Livro, 2008. 180 p.
- FERRARINI, F. O. C. **Desenvolvimento do conhecimento prático-profissional no processo de implementação de unidades didáticas multiestratégicas para o ensino de Química no contexto da formação inicial de professores**. 2020. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Araraquara, 2020.
- FERRAZ, A. P. C. M.; BELHOT, R. V. Taxonomia de Bloom: revisão teórica e apresentação das adequações do instrumento para definição de objetivos instrucionais. **Gestão & Produção**, v. 17, n. 2, p. 421-431, 2010.
- FILGUEIRAS, C. A. L. Gilbert Lewis e o centenário da Teoria de Ligação por Par de Elétrons. **Química Nova**, v. 39, n. 10, p. 1262-1268, 2016.
- FUKUI, K.; YONEZAWA T.; SHINGU, S. A Molecular Orbital Theory of reactivity in aromatic hydrocarbons. **The Journal of Chemical Physics**, v. 20, n. 4, p. 722-725, 1952.
- FUSARI, J. C. O planejamento do trabalho pedagógico: algumas indagações e tentativas de respostas. *In: A construção do projeto de ensino e a avaliação*. São Paulo: FDE, 1990. (Série Idéias, 8), p. 44-53.
- GALAVOTTI, J. S. O.; CEBIM, M. A.; BIM, L. F. B. Modelos e eletronegatividade: uma proposta de sequência didática para o Ensino de Química. **Química Nova**, v. 47, n. 2, 2024.
- GARRITZ, A. Historia de la química cuántica. **Educacion Química**, v. 25, p. 170-175, 2014.
- GILBERT, J. K.; BOULTER, C. L.; ELMER, R. Positioning Models in Science Education and in Design and Technology Education. *In: GILBERT, J. K.; BOULTIER, C. J. (Eds.). Developing Models in Science Education*. Dordrecht: Kluwer, 2000, p. 3-17.
- GONTIJO, L. M. A.; RODRIGUES, C. G. Radiação térmica e a fórmula de Planck. **Química Nova**, v. 45, n. 10, p. 1303-1314, 2022.
- HAYDT, R. G. C. **Curso de Didática Geral**: 1 ed. São Paulo: Ática, 2011. 248 p.
- HAYNES, W. M.; LIDE, D. R.; BRUNO, T. J. **CRC Handbook of Chemistry and Physics**, CRC Press, 95ª Ed., 2666 p., 2014.
- HEITLER, W.; LONDON, F. Interaction between neutral atoms and homopolar binding according to quantum mechanics. **Zeitschrift für Physik**, v. 44, n. 2, p. 455-472, 1927.
- HIBERTY, P.C.; VOLATRON, F.; SHAIK, S. In defense of the hybrid atomic orbitals. **Journal of Chemical Education**, v. 89, p. 575-577, 2012.
- HODSON, D. In search of a meaningful relationship: an exploration of some issues relating to integration in science and science education. **International Journal of Science Education**, v. 14, n. 5, p. 541-562, 1992.
- JUSTI, R. Modelos e Modelagem no Ensino de Química: Um olhar sobre aspectos essenciais pouco discutidos. *In: SANTOS, W. L. P.; MALDANER, O. A. (Orgs.). Ensino de Química em Foco*. 3ª Ed. Ijuí: Unijuí, 2015. Cap. 8, p. 209-230.

JUSTI, R.; GILBERT, J. K. Modelling, teacher's views on the nature of modelling, implications for the education of modellers. **International Journal of Science Education**, v. 25, n. 11, p. 1369-1386, 2003.

KRIPPENDORFF, K. **Metodologia de análisis de contenido**: teoria e práctica. Barcelona, Ediciones Paidós, 1990. 279 p.

LEWIS, G. N. The atom and the molecule. **Journal of the American Chemical Society**, v. 38, n. 4, p. 762-785, 2016.

LIBÂNEO, J. C. **Didática**. São Paulo: Cortez, 1990. 288 p.

MAHAN, B. M.; MYERS, R. J. **Química - um curso universitário**. 4ª Ed. São Paulo: Edgard Blucher, 2003. 604 p.

MAIA, P. F. **Modelagem e suas contribuições para o Ensino de Ciências**: uma análise no estudo de equilíbrios químicos. 2006. Dissertação (Mestrado em Educação) – Universidade Federal de Minas Gerais – Minas Gerais, 2006.

MARTINEZ, M. J.; OLIVEIRA LAHONE, C. E. **Planejamento escolar**. 2ª ed. São Paulo: Saraiva, 1978.

MARTINS, R. A. **Ensaio sobre História e Filosofia das Ciências**. Extrema: Quamcumque Editum, 2021. 242 p.

MENEGOLLA, M.; SANT'ANNA, I. M. **Por que planejar? Como planejar?: currículo, área, aula**. 14ª ed. Petrópolis: Vozes, 2005. 155 p.

MESSLER, G. L.; FISCHER, P. L.; TARR, D. A. **Química Inorgânica**. 5ª Ed. São Paulo: Pearson, 2014. 649 p.

MORAES, R. Análise de conteúdo. **Revista Educação**, v. 22, n. 37, p. 7-32, 1999.

MORALLES, V. A. **Vamos modelar, professor Hélio? Desenvolvimento do conhecimento prático-profissional por meio da implementação de uma Unidade Didática Multiestratégica**. 2021. Tese (Doutorado em Química) - Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Instituto de Química, Araraquara, 2021.

MORTIMER, E. F.; MACHADO, A. H.; ROMANELLI, L. I. A proposta curricular de Química do Estado de Minas Gerais: fundamentos e pressupostos. **Química Nova**, v. 23, n. 2, p. 273-283, 2000.

MULLIKEN, R. S. A new electroaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionizations potentials and electron affinities. **The Journal of Chemical Physics**, v. 2, p. 782-793, 1934.

MURRELL, J. N. The origins and later developments of Molecular Orbital Theory. **Internacional Journal of Quantum Chemistry**, 2011.

NOGUEIRA, H. S. A.; PORTO, A. P. Entre tipos e radicais: a construção do conceito de valência. **Química Nova**, v. 42, n. 1, p. 117-127, 2019.

OLABUENAGA, J.I. R.; ISPIZUA, M.A. **La descodificación de la vida cotidiana**: metodos de investigacion cualitativa. Bilbao: Universidad de deusto, 1989. 249 p.

PAULING, L. **The nature of the Chemical Bond**. 3ª Ed. Ithaca: Cornell University, 1960. 644 p.

PAULING, L. G. N. Lewis and the chemical bond. **Journal of Chemical Education**, v. 61, n. 3, p. 201-203, 1984.

PEIERLS, R. E. Wolfgang Ernst Pauli. 1900-1958. **Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society**, v. 5, p. 174-192, 1960.

PEREIRA, C. F. C.; ROCHA, A. B.; TAMIASSO-MARTINHON, P.; ROCHA, A. S.; SOUSA, C. Contextualização histórico-filosófica de orbitais atômicos e moleculares. **História da Ciência e Ensino**, v. 16, p. 18-35, 2017.

PILETTI, C. **Didática Geral**. 23ª Ed. São Paulo: Ática, 2004. 256 p.

ROSA, P. S. **Louis de Broglie e as ondas de matéria**. 2004. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física “Gleb Wataghin” – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2004.

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

SEABORG, G. T. Gilbert Newton Lewis: some personal recollections of a chemical giant. In: HARGITTAI, B., HARGITTAI, I. (eds.). **Culture of chemistry**. 1. ed. New York: Springer Science, 2015. Cap. 42, p. 127-139.

SOUZA, A. R.; TAVARES, T. M. A gestão educacional no Brasil: os legados da ditadura. **Revista Brasileira de Política e Administração da Educação**, v. 30, n. 2, p. 269-285, 2014.

STEFANI, C.; TSAPARLIS, G. Students Levels of Explanations, Models and Misconceptions in Basic Quantum Chemistry: A Phenomenographic Study. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 46, n. 5, p. 520-536, 2009.

STUDART, N. A invenção do conceito de quantum de energia segundo Planck. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 22, n. 4, p. 523-535, 2000.

SUTCLIFFE, B. T. The development of the idea of a chemical bond. **Internacional Journal of Quantum Chemistry**, v. 58, n. 6, p. 645-655, 1996.

TABER, K. S. Building the structural concepts of chemistry: some considerations from education research. **Chemistry Education: Research and Practice in Europe**, v. 2, n. 2, p. 123-158, 2001.

TANTARDINI, C.; OGANOV, A. R. Thermochemical electronegativities of the elements. **Nature Communications**, v. 12, n. 2087, 2021. DOI: 10.1038/s41467-021-22429-0.

THIOLLENT, M. **Metodologia da Pesquisa-Ação**. 18ª ed. São Paulo: Editora Cortez, 2011. 108 p.

VEIGA, I. P. A. Didática: uma retrospectiva histórica. In: VEIGA, I. P. A *et al.* (Orgs.). **Repensando a didática**. 25ª Ed. São Paulo: Papirus, 2005. Cap. 2, p. 33-54.

VOSNIADOU, S. Mental Models in Conceptual Development. In: MAGNANI, L.; NERSESSIAN, N. J. (Eds.). **Model-Based Reasoning**: Science, Technology, Values. New York: Kluwer Academic and Plenum Publishers, 2002. p. 353-368.

- WARTHA, E. J.; SANTOS, C. M. A.; SILVA, R. A. G. O conceito de eletronegatividade na Educação Básica e no Ensino Superior. **Química Nova**, v. 34, n. 10, p. 1846-1851, 2011.
- YIN, R. K. **Pesquisa qualitativa do início ao fim**. 1. ed. Porto Alegre: Editora Penso, 2016.
- ZABALA, A. **A prática educativa: como ensinar**. Porto Alegre: Artmed, 1998. 224 p.