



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 tentativa da inversão (σ) – π (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.

1.1 Hipótese de pesquisa

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) se vincula à interpretação moderna da ligação química junto ao mundo quântico fornecendo a previsão da estabilidade e existência de moléculas, a observação da manifestação da cor, a reatividade de sistemas moleculares, entre outros. Assim, uma proposta de ensino através do Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM), com o auxílio do planejamento didático-pedagógico por meio de uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM), contribui para uma melhor aprendizagem desse modelo científico pelos estudantes, sendo capaz de fornecer material para a literatura de uma temática relevante que ainda pode ser explorada junto ao Ensino. Além disso, há uma intrigante inversão conhecida como sigma (σ) – π (π) nos diagramas de orbitais moleculares na transição da entidade N_2 para O_2 . À essa inversão se propõe um caminho de análise através da eletronegatividade de Allen, possibilitando uma visão mais completa dos diagramas de orbitais moleculares.

1.2 Pergunta da pesquisa

Como foi o processo de ensino e aprendizagem de alunos do 1º ano do curso de bacharelado em Química do Instituto de Química da UNESP de Araraquara sobre a Teoria do Orbital Molecular (TOM) com o uso de uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM) fundamentada pela modelagem?

Além disso, sabendo que os diagramas de orbitais moleculares constituem parte relevante da Teoria do Orbital Molecular (TOM), como pode ser descrita a relação entre a eletronegatividade dos elementos químicos e a posição em energia dos orbitais moleculares nos diagramas para espécies diatômicas homonucleares expandindo o entendimento dos diagramas? E como as potencialidades da TOM podem ser correlacionadas junto as propriedades dos átomos isolados a fim de sugerir modelos explicativos acerca do comportamento da energia de

dissociação de moléculas diatômicas homonucleares formadas por elementos químicos do segundo período da tabela periódica?

1.3 Objetivos

O trabalho visa dois objetivos principais vinculados a Teoria do Orbital Molecular com base nas potencialidades dessa como modelo científico de ligação química:

- Analisar as contribuições de uma Unidade Didática Multiestratégica baseada no Ensino Fundamentado em Modelagem para abordagem da Teoria do Orbital Molecular voltada aos estudantes do Bacharelado em Química do Instituto de Química da UNESP de Araraquara.

- Elaborar uma correlação entre a posição em energia das configurações de valência dos átomos representativos, principalmente, do primeiro e segundo períodos da tabela periódica com os diagramas de orbitais moleculares estabelecidos por estes átomos em moléculas diatômicas homo e heteronucleares tornando possível a motivação clara da inversão sigma (σ) – pi (π).

Como desdobramento dos objetivos gerais são propostos os seguintes objetivos específicos:

- Elaborar um produto educacional direcionado ao Ensino da Teoria do Orbital Molecular com auxílio do planejamento didático pedagógico por meio de Unidades Didáticas Multiestratégicas e o uso de diferentes estratégias didáticas.

- Aplicar a Unidade Didática Multiestratégica, baseada no Ensino Fundamentado em Modelagem para abordagem da Teoria do Orbital Molecular a estudantes do Ensino Superior em Química do Instituto de Química.

- Analisar as contribuições do Ensino Fundamentado em Modelagem para abordagem da Teoria do Orbital Molecular.

- Construir um produto educacional acerca da Teoria do Orbital Molecular reunindo aspectos qualitativos e quantitativos que auxiliem os leitores na compreensão dos diagramas de orbitais moleculares de espécies diatômicas homo- e heteronucleares advindas dos átomos do primeiro e segundo período da tabela periódica.

2 LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO

A fim de compreender como a Teoria do Orbital Molecular (TOM) é trabalhada na área de Ensino em Química, foi feito um levantamento bibliográfico no acervo virtual de alguns periódicos a fim de conhecer o que foi produzido na área de Ensino de Química para a educação superior ao longo dos últimos anos. Foram estudados os trabalhos publicados entre os anos de 2010 e 2022 a partir de algumas questões orientadoras. Inicialmente, houve a intenção em saber o que vem sendo produzido no Ensino de Química almejando a educação a nível superior no Brasil. A partir disto, como as ligações químicas são tratadas nesse âmbito?

O que vem sendo produzido na área de Ensino de Química para a educação superior?

Para responder a essa questão foram selecionados os seguintes periódicos: Revista Brasileira de Ensino de Química, Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências, Revista Ciência e Educação, Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências, Investigações em Ensino de Ciências (IENCI), Química Nova e Química Nova na Escola (Qnesc). Os periódicos consultados são nacionais de acesso aberto e divulgam as pesquisas da área de Ensino de Química e Ensino de Ciências. A divulgação é feita por meio impresso e/ou online através da biblioteca digital Scielo ou de site próprio. Os periódicos são bem avaliados conforme o sistema Qualis Periódicos da Plataforma Sucupira/CAPES em que a classificação desses se encontra em A ou B. Desse modo, a boa avaliação na área de interesse, a facilidade de acesso e o contexto nacional guiaram a escolha desses periódicos. Além desses, foi realizado um levantamento a partir das teses e dissertações da CAPES.

Para a consulta acerca do tema foram utilizadas as palavras-chaves: ensino de química; ensino superior; química; ensino. Os artigos foram selecionados a partir da leitura dos títulos, resumos, palavras-chaves e, quando necessário, do texto completo. Dessa forma, foi possível conhecer o que vem sendo estudado na área de Ensino de Química para o Ensino Superior.

A Revista Brasileira de Ensino de Química apresentou 36 trabalhos. Estiveram presentes nas palavras-chaves dos trabalhos encontrados as seguintes temáticas e quantidades que foram citadas: metodologia de ensino CTSA (2), linguagem simbólica (1), experimentação (7), educação à distância (2), estratégias de ensino (1), evasão (1), formação docente (1), sequências de ensino-aprendizagem (1), história da ciência (1), concepções prévias (1), motivação para docência (1), prática docente (1), profissão docente (1), extensão (1), estágio supervisionado (1), química verde (6), formação de professores (9), formação

inicial de professores (1), interdisciplinaridade (1), modelos (3), filosofia da ciência (1), metodologias diferenciadas (2), educação inclusiva (1), licenciatura em química (1), currículo (1), tecnologia de informação e comunicação (1) e filosofia da ciência (1). As temáticas de formação de professores, experimentação e química verde foram as mais presentes no periódico.

O periódico Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências reportou 17 trabalhos. As temáticas que apareceram nas palavras-chaves foram: química verde (1), história da química (1), perfil dos estudantes (1), formação de professores (2), formação inicial de professores (1), necessidades formativas (1), ação mediada (1), ressignificação (1), análise do discurso (1), CTS (1), perfil conceitual (1), gramática de design visual (1), aprendizagem baseada em equipes (1), diretrizes curriculares (1) e análise de projeto pedagógico de curso (1). Nesse periódico, a formação de professores/formação inicial de professores teve maior presença.

A busca na Revista Ciência e Educação resultou em 15 trabalhos. As palavras-chaves indicaram que foram trabalhadas as temáticas: formação de professores (2), formação inicial de professores (1), ensino e aprendizagem (1), letramento digital (1), jogos (1), pesquisa em educação (1), didática (1), análise de discurso (2), inclusão (2), relação professor e estudante (1), prática docente (1) e análise semiótica (1). Em geral a formação de professores, a educação inclusiva e a análise de discurso em materiais se destacaram nesse período.

A consulta na Revista Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências apresentou 9 trabalhos, os quais, continham nas palavras-chaves: analogia (1), recursos educacionais (1), linguagem (1), modos semióticos e multimodalidade (1), formação de professores (2), laboratório de ensino (1), argumentação (1) e educação inclusiva (1).

A procura na Revista Investigações em Ensino de Ciências reportou 23 trabalhos. Nesses trabalhos foram encontradas as temáticas: CTS (1), evasão (1), produção acadêmica brasileira (1), formação de professores (5), formação inicial de professores (1), formadores de professores (1), livros didáticos (2), experimentação (2), pesquisa bibliográfica (1), texto-científico (1), química verde, relação com o saber (1), professor-pesquisador (1), currículo (1), contextualização (1), comunicação científica (1) e histórias em quadrinhos (1). Observou-se que a temática de formação de professores/formação inicial de professores teve maior incidência.

O levantamento na revista Química Nova forneceu 22 trabalhos para a pergunta de interesse, os quais, possuíam as temáticas: formação de professores (3), formação continuada de professores (1), ensino e aprendizagem (3), casos investigativos (1), desenvolvimento de

competências (1), História da Ciência/Química (3), linguagem científica (3), jogos de empresa (1), escrita científica (1), analogias (1), concepções alternativas (1), questões étnico-raciais (1), autoria coletiva (1) e aprendizagem colaborativa com suporte computacional (1).

O periódico Química Nova na Escola apresentou um total de 30 publicações com as temáticas: concepções dos professores (1), formação de professores (6), formação inicial de professores (2), prática docente (2), PIBID (5), contextualização (2), experimentação (3), educação ambiental (1), atividades lúdicas (1), licenciatura parcelada (1), currículo (1), modelos e representações (1), monografia de conclusão de curso (2), pesquisa-ação (1). Formação de professores/formação inicial de professores, PIBID e experimentação foram as temáticas com maior presença nesse periódico.

Pelo levantamento foi possível verificar que há uma abordagem maior em relação à formação de professores / formação inicial de professores e à experimentação no ensino superior no período analisado, além de um certo destaque em uso da CTSA (Ciência, Tecnologia, Sociedade e Ambiente) como metodologia de Ensino para a área da Química.

Quanto ao levantamento das teses de doutorado pela CAPES, foram encontrados 44 resultados. A grande maioria diz respeito à formação de professores (13), seguido da educação inclusiva (3) e divulgação científica (3). Outros assuntos foram tratados como saberes docentes (1), tecnologias educacionais (1), perfil conceitual (1), argumentação (2), revisão por pares (1), semiótica (1), currículo (1), Ilhas interdisciplinares de racionalidade (1), questões étnico-raciais (1), Concepções e obstáculos epistemológicos (1), práticas pedagógicas (1), química verde (1), recontextualização (1), casos investigativos (2), abordagem CCS (construcionista, contextualizada e significativa) (1), alfabetização científica (2), aprendizagem por ação coletiva (2), produção acadêmica em Química ou de pesquisa em ensino de química (2), ludicidade (1) e modelagem molecular (1).

Quanto ao levantamento das dissertações de mestrado pela CAPES, foram encontrados 101 resultados, sendo que 30 desses se referem a formação de professores. As outras temáticas retrataram: experimentação (8), educação não formal (1), mediação semiótica (1), políticas educacionais (1), alfabetização científica (4), tecnologia na educação (3), educação ambiental (5), evasão (1), elaboração de significados (1), revisão narrativa (1), aprendizagem significativa (1), educação inclusiva (3), permanência estudantil (3), analogias (1), CTSA (2), caracterização dos estudantes (3), concepções alternativas (3), ensino de química analítica (1), interações discursivas (1), tutorias (1), gêneros/educação sexual (1), livro didático (2), elaboração de material (5), conceitos científicos (4), abordagem cooperativa (2), currículo (3), questão étnico-racial (1), avaliação (1), jogos (3), História da Ciência (2), estudo de caso (1), estudo de material

(1). Com predomínio claro da formação de professores, não se encontrou um estudo aprofundado da TOM, mas um desses trabalhos – “As naturezas da ligação química covalente: uma proposta de perfil conceitual” de Ricardo Santos Baltieri - discutiu em forma de revisão narrativa o conceito de ligação química que é crucial nesse estudo.

- O que vem sendo produzido na área de Ensino de Química para o ensino de ligações químicas? O que essas pesquisas mostram?

Para responder a essa questão foram consultados os mesmos periódicos e o portal da CAPES, sendo observados alguns resultados para parte desses materiais. A partir do levantamento realizado foram encontrados dois artigos na revista Brasileira de Educação em Ciências. Em um deles, foram estudadas analogias quanto ao ensino de ligações químicas em escolas de ensino médio, tendo como título “Analogias sobre ligações químicas elaboradas por alunos do Ensino Médio” das autoras Paula Mendonça, Rosária Justi e Mary Mendes de Oliveira. O outro trabalho apresentado pela revista se refere a um levantamento em periódicos nacionais e internacionais que indicou que as concepções alternativas foram o assunto predominante quanto ao tema de ligações químicas – “Pesquisas em periódicos nacionais e internacionais sobre o ensino e aprendizagem de ligação química” dos autores Lucas Fernandes e Ângela Campos. Assim, o estudo acabou por indicar as concepções com maior frequência encontradas no Ensino de ligação covalente, ligação iônica e ligação metálica fornecendo ao leitor um panorama das múltiplas interpretações vinculadas ao tema.

Já na revista Investigações em Ensino de Ciências pode-se destacar o artigo – “Investigando aproximações entre textos de divulgação científica e livros didáticos de Química” dos autores Maria Costa de Oliveira, Leonardo Cantanhede e Severina Cantanhede. Esse artigo trouxe uma análise de livros didáticos e textos de divulgação científica aplicados ao tema de ligações químicas.

No periódico Química Nova foram encontrados três trabalhos da década de 1980 e 1990 sobre o assunto, sendo que esses discutem a compreensão da regra do octeto, a historicidade e a conveniência de seu uso na prática e no Ensino, sendo esses: “Tópicos em Ligação Química I: sobre o procedimento para escrever estruturas de Lewis” de Natarajan Subramanian, Antônio Filho e Teresa Saldanha; “Tópicos em Ligação Química II: sobre o mérito da regra do octeto” de Natarajan Subramanian, Antônio Filho e Teresa Saldanha e “Regra do octeto e Teoria da Ligação Química no Ensino Médio: Dogma ou Ciência?” de

Eduardo Mortimer, Gerson Mol e Lucienir Duarte. Apesar de se encontrarem fora do período em pesquisa, entende-se a importância desses trabalhos na discussão da regra do octeto.

Na revista Química Nova na Escola o tema “ligações químicas” é associado com jogos e atividades lúdicas para sua aprendizagem, mapas conceituais e análise de livros totalizando o encontro de 5 trabalhos. Foram eles: “Representações presentes nos livros didáticos: um estudo realizado para o conteúdo de ligação iônica a partir da Semiótica Peirceana” de Karina Scalco, Márcia Regina Cordeiro e Keila Kiill; “Os jogos educacionais de cartas como estratégia de Ensino em Química” de Joaquim Mendes da Silva, Antônio Carlos de Oliveira Guerra, Juliana Brandão, Enilce Vaitsman, Cláudia Barros, Anderson Cosme de Oliveira, Patrícia Focetola, Roberto Xavier de Almeida, Rafael Iack, Nádia da Silva Pedro, Lucas Grion, Aline Souza e Pedro Costa; “Iônico ou covalente? Dama Química como forma lúdica e interativa para o Ensino de Química na Educação Básica” de Lindaura Santos, Deise Lima, Maria José Sales e Eltamara Souza da Conceição; “Uso combinado de mapas conceituais e estratégias diversificadas de Ensino: uma análise inicial das ligações químicas” de José Odair da Trindade e Dácio Hartwig e “Análise sobre as formas de apresentação do conhecimento químico: o conceito de ligações químicas em livros didáticos” de Tavane Rodrigues, Fernanda da Silva, Bruno Pastoriza, Fábio Sangiogo, Alessandro Soares e Vitória Silva. As estratégias de ensino para as ligações químicas, como as atividades lúdicas e o mapa conceitual revelam o interesse por formas de abordagem desse conteúdo revelando uma certa tendência em como tratar esse assunto em sala de aula.

Um levantamento também foi realizado na plataforma Scielo em que 3 resultados indicavam que a área de Ensino trouxe trabalhos sobre ligação química. Foram eles: “A solubilidade dos compostos iônicos: como os licenciandos em Química explicam o comportamento do cloreto de prata” de Analice de Almeida Lima e Isauro Beltrán Núnes; “Ligações entre metais: reflexões a partir dos modelos empregados em livros didáticos brasileiros de química” de Wilmo Francisco Júnior, Erivaldo da Silva e Wellington Francisco e “Ligações químicas em livros didáticos de química: uma análise dos elementos dos gêneros de discurso” de João Freitas Filho, Sírrio Silva, Cleiton Souza, Ladjane de Freitas, Juliano Freitas e Jucleiton Freitas. A busca resultou em trabalhos que realizam uma análise no texto em livros didáticos para o ensino médio, mostrando a importância da definição de ligação química no século XX por Gilbert Lewis e as possíveis falhas representacionais e textuais dos livros que acabam colaborando para o estabelecimento de compreensões equivocadas. Dificuldades de uso das ligações iônicas surgem no trabalho dos autores Almeida Lima e

Beltrán Nunes que ressaltam a importância de discussões durante a formação inicial de professores.

Dessa forma, o levantamento revela que o estudo de ligações químicas reúne, principalmente, a análise de livros didáticos, o levantamento de concepções alternativas frente às ligações iônica, metálica e covalente e o uso de estratégias de ensino diversificadas para abordagem do assunto. Em quaisquer dos trabalhos houve foco para a TOM, mesmo sendo um modelo científico de ligação química. Parte disso se dá pela concentração de trabalhos voltados à ligação química em nível escolar. Quando focamos nossa leitura ao Ensino Superior, encontramos apenas um trabalho que trata com maior afinco sobre a TOM: “Diagramas de energia de orbitais em livros didáticos de Química Geral: uma análise sob o viés da Semiótica Peirceana” dos autores Evandro Rozentalski e Paulo Alves Porto. Nesse trabalho é feita uma análise das representações de diagramas trazidas por livros didáticos do Ensino Superior, observando contextos de aplicação, objetivos e possíveis interpretações equivocadas que podem ser geradas. Assim, em âmbito nacional, a Teoria do Orbital Molecular ainda não é amplamente estudada, o que estimula a proposta de um produto educacional voltado ao seu Ensino e discussão, além de apontamentos sobre o desenvolvimento do tema em sala de aula e a compreensão dos estudantes.

O portal da CAPES reportou 3 teses para a pesquisa, sendo uma delas de estudo do conceito de ligação química. Quanto às dissertações foram reportados outros 3 trabalhos, sendo 2 deles de perfil conceitual da ligação química: Livros didáticos de Química: uma análise à luz do perfil conceitual para o conceito de ligação química de Vivian Parra e o trabalho já mencionado de Ricardo Baltieri. O outro trabalho se refere ao estudo do tratamento desse tema em livros didáticos – Ligação Química: Do Saber Sábio ao Livro Didático de Cleidon Guimarães. Logo, as ligações químicas constituem objeto de interesse em seus significados como reportados pela pesquisa, porém nota-se que a abordagem da TOM encontra espaço no Ensino de Química para uma proposta de abordagem por meio de Unidades Didáticas Multiestratégicas.

É importante destacar que os planos de ensino da disciplina de Química Geral do Instituto de Química trazem que a Teoria do Orbital Molecular faz parte do conteúdo da disciplina, bem como são indicados livros como referências bibliográficas para estudo. Não foram utilizados como base para o levantamento os planos de ensino organizados para cada universidade, pois teve-se a intenção de compreender as publicações elaboradas pelos pares.

3 JUSTIFICATIVA

Espera-se que o trabalho contribua com o campo de Ensino de Química ao tratar a Teoria do Orbital Molecular (TOM) como um modelo científico de ligação química, sendo essa teoria pouco aprofundada na literatura da área mencionada. Essa percepção se dá devido ao levantamento realizado que indicou espaço para a tratativa do assunto. Para isso, foi elaborada uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM) sobre a TOM, embasada na metodologia do Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM). Ademais, o trabalho objetiva propor uma discussão a respeito da inversão $\sigma - \pi$ em diagramas de orbitais moleculares do segundo período da tabela periódica usando a eletronegatividade de Leland Allen.

4 REFERENCIAL TEÓRICO

Conforme Martins (2021), a mecânica quântica surgiu por volta de 1900 com as contribuições de Max Planck acerca da radiação do corpo negro, embora um considerável desenvolvimento ocorreu nos anos de 1920. Foi nessa década também que a Teoria do Orbital Molecular (TOM) se desenvolveu a partir dos estudos de Robert Mulliken, Friedrich Hund, John Lennard-Jones e Edward Condon (Murrell, 2011). O desenvolvimento histórico da TOM será abordado de maneira que acontecimentos importantes para o desencadear da teoria sejam lembrados neste capítulo. Assim, os prelúdios da química quântica e da ligação química serão referidos para a ênfase trazida a TOM.

4.1 Anos de 1900 a 1910

As radiações eletromagnéticas são o resultado de campos elétricos e magnéticos oscilantes que percorrem o vácuo na velocidade da luz (c) equivalente a $2,99.10^8$ m/s. Alguns exemplos de radiação eletromagnética são a luz visível, as ondas de rádio e micro-ondas. A emissão de luz por objetos quentes, conhecida como radiação de corpo negro também é de natureza eletromagnética e foram um desafio para a Física Clássica. O corpo negro consiste em um objeto capaz de absorver toda a radiação eletromagnética nele incidente, conforme explica Studart (2000). O princípio do corpo negro foi proposto em 1860 por Robert Kirchoff que também deduziu a relação da absorção e emissão de calor em função do comprimento de onda absorvido ou emitido em temperatura específica (Gontijo; Rodrigues, 2022). Um objeto com características similares ao de um corpo negro ideal consiste em um forno, isolado termicamente, revestido internamente de material metálico e com um orifício voltado ao exterior (Studart, 2000). No corpo negro, toda a radiação incidente que adentra pelo orifício é refletida em seu próprio interior (Studart, 2000). Ao aquecer um corpo negro, há emissão da radiação eletromagnética em seu interior o que promove a reabsorção contínua, sendo que apenas uma parte das emissões evade através do orifício. Isso origina um espectro contínuo de frequências. Essas radiações emitidas apresentarão um máximo de intensidade em determinado comprimento de onda. A grande questão para a Física Clássica na época é que conforme a temperatura é elevada, a quantidade de energia emitida pelo corpo negro também aumenta o que provoca o deslocamento da intensidade da radiação emitida para comprimentos de onda cada vez mais curtos. Logo, a intensidade da radiação emitida por objetos quentes poderia tender ao infinito em comprimentos de onda muito curtos e as transferências de energia entre

os corpos não teriam restrição. A esse dilema se dá o nome de catástrofe do ultravioleta (Gontijo; Rodrigues, 2022).

O físico alemão Max Karl Ernst Ludwig Planck sugeriu, em 1900, uma outra forma de tratar a transferência de energia. Para o cientista deveria haver uma energia mínima para essas transferências. Planck investigou a matéria que emite a radiação, considerando-a como constituída por osciladores cuja energia seria múltipla de quantidades determinadas. Assim, quando uma radiação de frequência ν é gerada por um oscilador, por exemplo, deve haver uma energia mínima para que ele oscile. Levando essa ideia para o sistema atômico, os átomos do material do corpo negro podem emitir ou absorver radiação eletromagnética em determinadas frequências. Após o estudo de equações formuladas por cientistas como John William Strutt (Lord Rayleigh), Ludwig Boltzmann, Josef Stephan, Wilhem Wien, entre outros, para a tratativa das relações de intensidade de energia x comprimento de onda x temperatura, Planck considerou que osciladores só podem emitir energia em determinadas quantidades (Studart, 2000). Assim, a energia poderia ser liberada ou absorvida pelos átomos do corpo negro em quantidades definidas. Planck nomeou a menor quantidade de energia emitida ou absorvida como radiação eletromagnética como quantum. A descrição da quantidade de energia transferida (E) entre um sistema atômico e a vizinhança é reconhecida pela (Equação 1).

$$E = n \cdot h \cdot \nu \quad (\text{Equação 1})$$

Em que, $n = 1, 2, 3, \dots$, h é a constante de Planck igual a $6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ e ν é a frequência.

A quantização da energia solucionava o problema da catástrofe do ultravioleta, servindo apenas para osciladores materiais. De forma quantizada, a energia é emitida e absorvida por múltiplos da constante de Planck.

A quantização da energia proposta por Planck foi trazida para a luz por Albert Einstein em 1905 no contexto do efeito fotoelétrico. O efeito fotoelétrico, descoberto em 1887 por Heinrich Rudolf Hertz, consiste na emissão de elétrons de superfícies metálicas após emissão de determinadas frequências de luz. Phillip Lenard realizou alguns experimentos para identificar que o comportamento do efeito fotoelétrico era condizente com as ideias da época. Para isso, estudou a emissão de elétrons de um metal. Lenard incidiu sobre uma placa de metal, isolada ao vácuo em um recipiente de vidro, uma luz branca. Disso, mediu a velocidade dos elétrons e era esperado que o aumento da intensidade de luz incidente provocasse uma resposta de velocidade maior daqueles ejetados. O efeito fotoelétrico também deveria funcionar com

qualquer frequência de luz desde que a energia incidente fosse intensa. Caso a intensidade da luz fosse baixa, então haveria um tempo maior para ejeção dos elétrons da placa metálica. Entretanto, nada disso se provou válido com as experimentações. O que se observou foi que havia uma frequência mínima de luz incidente para que cada metal tivesse seus elétrons ejetados. A energia cinética desses elétrons aumentava com maior frequência de luz e não com a intensidade, um contraponto para a Física Clássica.

Para explicar a emissão associada a uma frequência apropriada para cada metal e a independência da intensidade de luz, Einstein usou a quantização de energia por Planck como característica universal da luz, assim, ela é constituída por quantas isolados de energia, reconhecidos como fótons. A emissão de um elétron depende então da absorção de um fóton de energia $h.\nu$, como Planck demonstrou. Realizando a modificação necessária para cada metal do efeito fotoelétrico, a interpretação desse efeito consiste na (Equação 2).

$$E = h.\nu - w \quad \text{(Equação 2)}$$

Em que, $n = 1, 2, 3, \dots$, h é a constante de Planck igual a $6,626.10^{-34}$ J.s, ν é a frequência e w é a energia necessária para retirar um elétron do metal, sendo comumente chamada de função trabalho.

Dessa maneira, Einstein ampliou a ideia de quantização de energia para a luz tratando-a como formada por inúmeras partículas (os fótons), complementando o comportamento ondulatório da radiação.

Alguns anos depois, em 1908, o físico e químico Ernest Rutherford apresentou à comunidade científica um modelo atômico que descrevia um pequeno e denso núcleo com cargas positivas com os elétrons localizados a uma certa distância. Esse modelo desafiava a Física Clássica por conta da estabilidade do átomo. Ao supor que as partículas positivas estejam paradas, se espera que haja uma atração eletrostática entre elas e as de carga negativa, resultando em liberação de energia. Essa proposição vem do experimento trabalhado por Rutherford, Johannes Wilhelm Geiger e Ernest Marsden, em que organizaram a emissão de partículas alfa em uma lâmina de ouro posicionada à frente de uma tela de sulfeto de zinco que atua como um anteparo luminescente para detecção do desvio, tendo o vácuo entre a lâmina e o anteparo (Atkins; Jones, 2012). O desafio da estabilidade foi questionado e resolvido por Niels Bohr. Bohr aplicou a quantização de energia ao átomo de hidrogênio. Nesse contexto, o movimento dos elétrons se dava em órbitas quantizadas. A quantização foi introduzida por meio do momento angular L do elétron em órbitas definidas pelo número quântico principal n junto à

quantização dada pela constante de Planck (h) conforme a (Equação 3). O número quântico principal n , portanto, se relaciona a energia do orbital, assumindo qualquer valor inteiro positivo.

$$L = n \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (\text{Equação 3})$$

Essa proposta de modelo atômico parte da discussão da quantização de energia apresentada por Planck. A relação da quantização das órbitas, expressa pela (Equação 3), resolveu a questão da estabilidade mostrando que as transferências de energia aconteceriam na transição de uma órbita a outra, assim as emissões e absorções ocorrem entre órbitas ditas permitidas. Apesar de superar a questão da estabilidade, o modelo fora criado com base na imposição de um número quântico, o que se tornou mais claro após o trabalho divulgado por Erwin Schrödinger em 1926.

4.2 Anos de 1911 a 1920

Durante a primeira metade do século XIX, de acordo com Nogueira e Porto (2019), o termo ligação e valência era considerado sinônimo. Segundo o *Gold Book* da *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC, 2023), valência pode ser definida como o número máximo de átomos univalentes (originalmente átomos de hidrogênio ou cloro) que podem se combinar com um átomo do elemento em consideração, ou com um fragmento, ou para o qual um átomo deste elemento pode ser substituído. A trajetória de construção desse conceito possui três etapas conforme proposto por Araújo Neto (2007): de 1850 a 1870 há a emergência do conceito e o desenvolvimento de pesquisas na área da química orgânica, de 1870 a 1920 há o aumento da divulgação do conceito em âmbito acadêmico e, posteriormente, a terceira fase é marcada pelo confronto entre as ideias passadas de valência e as noções modernas a partir de métodos físicos aplicados ao estudo das estruturas das substâncias. O estudo das reações orgânicas por substituição, através das teorias dos radicais e dos tipos, junto ao desenvolvimento de métodos e técnicas, possibilitou a definição de valência e a diferenciação entre essa e a ligação química. Destaca-se que a Teoria dos Tipos foi elaborada por Jean Baptiste Dumas em 1839 a partir de estudos de reações orgânicas e é considerada como a maior influenciadora sobre a teoria de valência. Os tipos representavam um conjunto de átomos que compunham os compostos químicos. Dumas definiu os tipos em tipos mecânicos e tipos químicos. Os tipos mecânicos consistiam em um conjunto de átomos unidos para formar as

substâncias resultando em uma fórmula geral. Já os tipos químicos se referiam ao conjunto de átomos responsáveis pelas propriedades químicas das substâncias. Ambos os tipos poderiam ser iguais ou diferentes (Nogueira; Porto, 2019). Dumas desenvolveu essa teoria após um evento, no qual, o aroma das velas causava tosse aos presentes. O químico determinou que o cloro presente nas velas era o responsável pela irritação. Ao investigar o que podia ter acontecido, Dumas observou que átomos de cloro substituíam os de hidrogênio em alguns compostos orgânicos, contrariando a teoria dualística (Nogueira; Porto, 2019). Uma apresentação detalhada sobre o assunto é encontrada no trabalho de Nogueira e Porto (2019).

Segundo Santos, Silva e Wartha (2011), Gilbert Newton Lewis, (**Figura 1**), foi um dos responsáveis por atribuir um significado à valência. Para Lewis o número de valência ou valência consiste no número de posições ou regiões ou pontos (terminais de ligação) no átomo em que o apego aos pontos correspondentes em outros átomos ocorre, indicando as possibilidades que um átomo apresenta em se combinar com outro. Lewis também distinguiu valência e número polar. Para Lewis o número polar representava o número de elétrons perdidos por um átomo, o que é interpretado, atualmente, como número de oxidação. Essa diferença de número de valência e número polar é relevante para o esclarecimento de que as ligações envolvem transferência eletrônica, ou seja, um átomo aceita e doa elétrons.



Figura 1 - Gilbert Newton Lewis.

Fonte: Seaborg (2015).

Além de contribuir nas discussões referentes a termos como valência e número polar, nos anos iniciais do século XX, Lewis propôs hipóteses relativas ao arranjo de elétrons em um átomo o que levaria a maior clareza do entendimento do que viria a ser a ligação química. Esse passo foi fundamental para a formulação das teorias de ligação química subsequentes como a Teoria da Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Em 1902, Lewis esboçava um modelo de átomo que representa suas primeiras impressões sobre essa organização atômica chamando-a de teoria do modelo cúbico. Esse modelo se organizava acerca de elétrons arranjados em cubo concêntrico. O cubo com 8 elétrons correspondia aos átomos da família 18, sendo esse cubo tratado como um caroço de referência para o período posterior. Além disso, a transferência eletrônica mencionava a natureza de ceder elétrons, como no caso do cloro e no recebimento desses, exemplificado pelo magnésio.

Em 1916, Lewis publicou o artigo intitulado “O átomo e a molécula” com a discussão ampliada sobre a teoria do modelo cúbico, agora apresentado como átomo cúbico (**Figura 2**), apontando uma ilustração do átomo por meio de um cubo. O modelo de átomo cúbico deu origem a compreensão da ligação química. No modelo de átomo cúbico, os elétrons de valência são organizados de modo que ocupem os vértices do cubo, podendo variar de 0 a 8 o número de elétrons. Esses elétrons estariam disponíveis para formar ligações químicas, como sugerido por Lewis (1916), a partir do entendimento que os dois elétrons são simbolizados por pontos. Esses pontos são dispostos entre dois núcleos atômicos a fim de sugerir o compartilhamento do par eletrônico entre dois núcleos. Os núcleos, por sua vez, podem ser representados de maneira geral através dos símbolos dos elementos químicos. Assim, a colocação desses pontos entre dois átomos representa a ligação química conforme a **Figura 3** (Filgueiras, 2016).

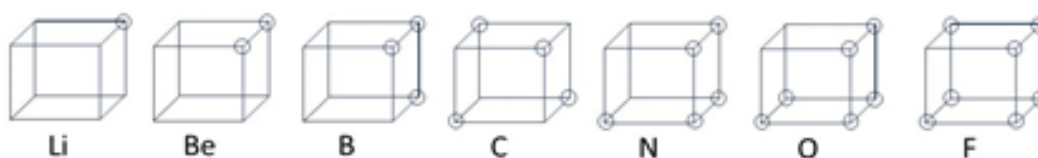


Figura 2 - Representação do modelo do átomo cúbico.

Fonte: Adaptado de Lewis (1916, p. 767).

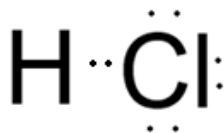


Figura 3 - Representação da ligação química por pontos.

Fonte: Obra dos autores.

A distribuição dos elétrons de valência pela estrutura cúbica acompanhou seis postulados (Lewis, 1916, p. 768, tradução livre).

1. Em cada átomo há um “caroço” essencial que permanece inalterado em todas as mudanças químicas ordinárias e que possui um excesso de cargas positivas correspondendo em número ao número ordinal do grupo na tabela periódica ao qual pertence o elemento.
2. O átomo é composto do caroço e de um átomo externo ou camada que, no caso do átomo neutro, contém elétrons negativos em número igual ao excesso de cargas positivas no caroço, mas o número de elétrons na camada pode variar durante a transformação química entre 0 e 8.
3. O átomo tende a ter um número par de elétrons na camada (de valência), e especialmente a ter 8 elétrons que são normalmente arranjados simetricamente nos 8 vértices de um cubo.
4. Duas camadas atômicas são mutuamente interpenetráveis.
5. Os elétrons podem ordinariamente passar prontamente de uma posição na camada externa para outra. Não obstante, eles são mantidos em posição por limitações mais ou menos rígidas, e essas posições e a grandeza das limitações são determinadas pela natureza do átomo e dos outros átomos que estejam combinados com o primeiro.
6. As forças elétricas entre partículas que estejam muito próximas não obedecem à simples lei do inverso dos quadrados que prevalece em distâncias maiores.

A organização do modelo do átomo cúbico junto às ideias de união entre átomos trouxe o reconhecimento de que a ligação química é resultado do compartilhamento de um par eletrônico entre átomos. Assim a ligação química ficou marcada como um par de elétrons ligados por dois átomos. Apesar das grandes contribuições ao longo da vida sobre a natureza da ligação química e a termodinâmica, Lewis não foi reconhecido com um Prêmio Nobel, apesar de ter recebido diversas honrarias.

4.3 Anos de 1921 a 1930

Na área científica, um popularizador da teoria de Lewis foi Irving Langmuir. Na década de 1920, a divulgação científica de Langmuir acompanhava a pausa temporária de Lewis a serviço do governo norte-americano durante a I Guerra Mundial. Por conta da coordenação da Escola de Defesa contra Gases da Força Expedicionária Americana, Lewis se afastou da publicação de novos trabalhos. Concomitantemente, Langmuir publicou artigos e proferiu palestras sobre o modelo de ligação química de Lewis, estudando e propondo melhoras. Langmuir nomeou a ligação química de Lewis como ligação covalente e criou os conceitos de eletroneutralidade e isosterismo. A eletroneutralidade consiste na organização dos elétrons de uma molécula de modo que as cargas formais nos átomos sejam nulas ou próximas a zero, garantindo maior estabilidade na formação de ligação covalente. Langmuir descreveu o isosterismo apontando que as moléculas com um número igual de núcleos e igual número de elétrons possuem, em geral, as mesmas estruturas. Consequentemente, Langmuir concluiu que, dentre tantas outras, as moléculas CO_2 , N_2O , NCO^- e NNN^- são lineares (Pauling, 1984).

Acredita-se que Lewis não simpatizava com Langmuir, considerando que esse tentava se apropriar do seu trabalho sobre ligação química. Além das palestras e artigos publicados, Langmuir cunhou a palavra “covalência” ao se referir a ligação química, entre dois átomos, com compartilhamento eletrônico e o “octeto” a organização de até 8 elétrons no átomo cúbico (FILGUEIRAS, 2016). Quando questionado em 1923 sobre a colaboração de Langmuir ao tema, Lewis respondeu “*na verdade, o trabalho do Dr. Langmuir tem sido totalmente independente, e tais adiões como ele fez ao que foi declarado ou implícito no meu trabalho deve ser creditado a ele sozinho*” (apud Pauling, 1984, p. 202, tradução livre). Ademais:

Tem sido motivo de muita satisfação para mim que no curso desta série de aplicações da nova teoria, conduzida com a maior perspicácia, o Dr. Langmuir não foi obrigado a mudar a teoria que avancei (Lewis, 1923, apud Pauling, 1984, p. 202, tradução livre).

Avançando sobre a mecânica quântica, se destacam alguns cientistas, dentre eles Wolfgang Pauli, responsável por aprimorar a física quântica aplicada aos elétrons. Após o modelo atômico de Bohr, o físico alemão Arnold Sommerfeld propôs uma modificação em que o elétron se moveria em órbitas elípticas ao redor do núcleo. Assim como Bohr, Sommerfeld associou ao modelo um número quântico, no caso, os outros três conhecidos – l , ml e ms . O número quântico secundário l descreve o momento angular do elétron e identifica o orbital. O terceiro número quântico, ml , corresponde ao número quântico magnético e retrata a orientação dos orbitais. O quarto número quântico, ms , é denominado como número quântico magnético

de spin que indica a orientação do spin do elétron em relação à direção do campo magnético intrínseco ao interior do átomo (Atkins; Jones, 2012). Porém, avançando sobre a mecânica quântica, Wolfgang Pauli, foi responsável por aprimorar a física quântica aplicada aos elétrons. Através de suas pesquisas, descobriu-se que o elétron possui um momento magnético intrínseco o que acarreta o aumento do número de níveis de energia que pode ocupar e na orientação do seu spin. Pauli determinou, em 1925, o Princípio da Exclusão que orienta a descrição da estrutura atômica. O Princípio da Exclusão de Pauli diz que dois férmions, partículas com spin semi-inteiro, não podem ocupar simultaneamente o mesmo estado quântico, consequentemente, o par de elétrons em cada orbital deve apresentar ao menos um número quântico diferente do outro (Peierls, 1960).

A natureza do elétron também foi discutida na década de 1920. Louis Victor Pierre Raymond, conhecido como Louis de Broglie foi um físico francês que propôs uma natureza ondulatória associada a partículas. Em 1924, De Broglie observara que a dualidade onda-partícula proposta por Einstein para a luz poderia ser estendida para partículas, incluindo os elétrons (Rosa, 2004).

Sobre isso, De Broglie disse:

Uma grande luz se fez em meu espírito, de forma súbita. Eu fiquei convencido de que o dualismo das ondas e dos corpúsculos descoberto por Einstein em sua teoria dos quanta de luz era absolutamente geral e se estendia a toda a natureza física (De Broglie, 1987, p. 103-104, tradução livre).

A hipótese de De Broglie para o caráter dualista dos elétrons foi comprovada experimentalmente por Clinton Joseph Davisson e Lester Germer em 1927. Nesse experimento, um filamento é aquecido e emite um feixe de elétrons sob um cristal de níquel que atua como uma rede de difração devido ao arranjo ordenado dos átomos. O resultado foi que a intensidade do feixe espalhado apresentava um máximo que respeitava as relações de comprimento de onda, ângulo de incidência e distância entre os planos proposto por William e Lawrence Bragg, tratando-se das interferências construtivas. Com o comportamento ondulatório apresentado pelos elétrons, a natureza sugerida por De Broglie às partículas ganhou ainda mais reconhecimento e ficou conhecida através da (Equação 4) que relaciona o comprimento de onda (λ) e o momento (p), sendo que h corresponde a constante de Planck de valor igual a $6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.}$ (Atkins; Jones, 2012).

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{Equação 4})$$

A hipótese de De Broglie influenciou o físico alemão Erwin Schrödinger a escrever a equação de propagação das ondas de matéria por incentivar a ideia de que a quantização pudesse ser tratada como um problema de autovalor, pois De Broglie sugeriu uma explicação para a quantização do modelo Bohr-Sommerfeld em termos de ondas estacionárias de forma a considerar uma trajetória unidimensional do elétron (Martins, 2021). A motivação de Schrödinger consistia em obter, de modo natural, a quantização do átomo, dada de modo arbitrário por Bohr-Sommerfeld, fundamentando-se na ideia de ondas estacionárias junto a uma análise em que as ondas ocupem qualquer lugar do espaço conforme explica Martins (2021).

Segundo Martins (2021), utilizando a velocidade de onda associada ao elétron, Schrödinger deduziu uma equação de movimento ao elétron em três dimensões tendo uma função de onda (Ψ) como solução que representa o caráter ondulatório de uma partícula. A sua teoria não dependia da teoria da relatividade, permitindo-lhe a aplicação em sistemas acelerados e em rotação, a partir do uso de coordenadas generalizadas e de um sistema conservativo geral.

Foram 6 artigos publicados em poucos meses com o título geral “Quantização como um problema de autovalores”, (Martins, 2021).

De acordo com Schmidt (2008), o físico iniciou a sua proposta com a introdução da equação de Hamilton-Jacobi em que a energia (E) é descrita conforme a (Equação 5):

$$E = H.\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) \quad (\text{Equação 5})$$

Em que H é a função hamiltoniana, q corresponde a coordenadas gerais e S corresponde a uma função geradora de uma transformação de coordenadas no espaço de configuração (Bertin; Pimentel; Pompeia, 2007). Schrödinger substituiu S por uma função Ψ , obtendo a (Equação 6).

$$S = k. \ln \Psi \quad (\text{Equação 6})$$

Desse modo, a função Ψ pode ser descrita em forma exponencial (Equação 7) o que aparecia no trabalho de De Broglie (SCHMIDT, 2008). Posteriormente, o físico fez uma derivada parcial de S e Ψ em relação as coordenadas gerais para substituir na (Equação 5), obtendo (Equação 8).

$$\psi = e^{\frac{S}{\hbar}} \quad (\text{Equação 7})$$

$$E = H.\left(q, \frac{\hbar}{\psi} \frac{\partial S}{\partial q}\right) \quad (\text{Equação 8})$$

Schrödinger reescreveu a (Equação 8) colocando Ψ em função quadrática de suas derivadas em relação às coordenadas gerais, assumindo a forma da (Equação 9).

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}\right) + \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right) - \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi^2 = 0 \quad (\text{Equação 9})$$

Em que m e e correspondem, respectivamente, a massa e a carga do elétron, r é a distância do elétron ao núcleo. O laplaciano da função de onda Ψ corresponde aos três primeiros termos da (Equação 9). Na teoria de Schrödinger as ondas formam um sistema de oscilações tridimensional em torno do núcleo atômico. A função Ψ é real nesse caso e Schrödinger não apresentou um significado físico a ela segundo Martins (2021). Uma das condições da equação de onda é que essa deveria ter solução unívoca o que reflete na quantização de energia sob a condição de ondas estacionárias. Já que sua ideia traz as ondas como um sistema de oscilações tridimensional, embora não se mencione a natureza delas, o que se tem é um tratamento de ondas estacionárias semelhantes em uma cavidade tridimensional (Martins, 2021). A partir disso, a equação obtida por Schrödinger assume a forma da (Equação 10) sendo aplicada para o átomo de hidrogênio.

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi = 0 \quad (\text{Equação 10})$$

Em relação a quantização de órbitas, Schrödinger conseguiu propor uma interpretação das ideias de Bohr através da frequência (ν) da radiação emitida pelo átomo – (Equação 11).

$$\nu = \frac{(E_1 - E_2)}{h} \quad (\text{Equação 11})$$

Para Schrödinger cada estado estacionário teria uma frequência própria e a passagem de um nível de energia para outro seria similar ao processo de coexistência de duas ondas de frequências diferentes produzindo um batimento de frequência equivalente à diferença da frequência entre as ondas (Martins, 2021).

Conforme Martins (2021), Schrödinger usou a sua teoria no estudo do oscilador harmônico de um sistema rígido em rotação com eixo fixo, um sistema rígido em rotação com eixo livre, e um sistema com rotação e vibração. Para o oscilador harmônico simples, o físico observou que a quantização de energia correspondia aos dados de energia encontrados por Heisenberg conforme a (Equação 12).

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot h\nu \quad (\text{Equação 12})$$

No terceiro artigo, Schrödinger discutiu a equivalência entre a mecânica ondulatória e matricial (MARTINS, 2021). No quarto trabalho, aplicou métodos de perturbação em sistemas complexos para a obtenção de soluções aproximadas (Martins, 2021).

De acordo com Martins (2021), no último artigo Schrödinger usou a dependência do tempo como parâmetro, o que implicava na energia total não ser constante a todo momento. Isso exigiria a modificação da função de onda em forma imaginária. Assim, a equação de Schrödinger independente do tempo se apresenta conforme a (Equação 13), sendo vista como uma maneira de conhecer a evolução temporal e espacial da forma de onda associada a partícula, embora não determine a posição exata da mesma.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \cdot \psi(x,t) = \frac{i\hbar \partial \psi(x,t)}{\partial t} \quad (\text{Equação 13})$$

Ainda na década de 1920, duas teorias com base em cálculos de mecânica quântica emergiram para o estudo de estruturas moleculares, sendo elas a Teoria da Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM) conforme Pereira *et al.* (2017). Os físicos alemães Walter Heitler e Fritz London fundamentaram a TLV como uma teoria que descreve os pares eletrônicos de valência compartilhados por orbitais atômicos (Pereira *et al.*, 2017). Os “pares eletrônicos de valência” remetem ao modelo de ligação química de Lewis que introduziu a ideia do que vem ser a ligação química, atuando como a base de elaboração e desenvolvimento da TLV que, por sua vez, funciona como uma tradução de viés mecânico quântico das ideias de Lewis (Pereira *et al.*, 2017). Em 1927, os físicos publicaram o trabalho intitulado “*Interaction between neutral atoms and homopolar binding to Quantum Mechanic*” em que descrevem a molécula de di-hidrogênio a partir da mecânica quântica. O princípio do artigo cerca a aproximação de dois átomos de hidrogênio neutros, no estado fundamental, separados a uma

distância “ r ” entre os núcleos atômicos formando uma ligação covalente a partir da sobreposição de orbitais atômicos.

Tomando os elétrons como entidades pertencentes aos átomos em ligação e atribuindo-lhes funções de onda, Heitler e London (1927) adotaram uma “degenerescência dupla” que consiste em considerar as possibilidades de localização de um elétron nos átomos da molécula. Supondo uma molécula diatômica AB, o elétron do átomo A pertence oras ao átomo A e oras ao átomo B. Já o elétron B do átomo correspondente aparece em um momento no átomo A e em outro no átomo B, conforme exemplificado na **Figura 4**, sendo descrito esse fenômeno como a ressonância (Heitler; London, 1927). Apesar das trocas de posições, a energia do elétron não muda em sistemas diferentes de autofunção (a Ψ é uma autofunção do sistema, pois quando o operador hamiltoniano age sobre a função de onda, decorre a energia como autovalor ao multiplicá-la pela própria função de onda). Essa medida ponderada pelos físicos remete as possíveis contribuições iônicas dos átomos na formação da ligação covalente. Logo, a ligação química é entendida como predominante covalente ou ainda predominante iônica a depender das contribuições da natureza dos átomos constituintes. A sobreposição dos orbitais atômicos, quando significativa e em equilíbrio com as interações eletrostáticas de atração e repulsão entre as cargas a determinada distância internuclear, se encontra em energia potencial baixa. Se a aproximação persistir, diminuindo a distância de equilíbrio internuclear, a energia potencial do sistema molecular se eleva em resposta ao predomínio da repulsão das interações eletrostáticas, sendo que tal processo é explicitado por meio da **Figura 5**.



Figura 4 - Ilustração do fenômeno de ressonância em uma molécula diatômica heteronuclear AB.

Fonte: Obra dos autores.

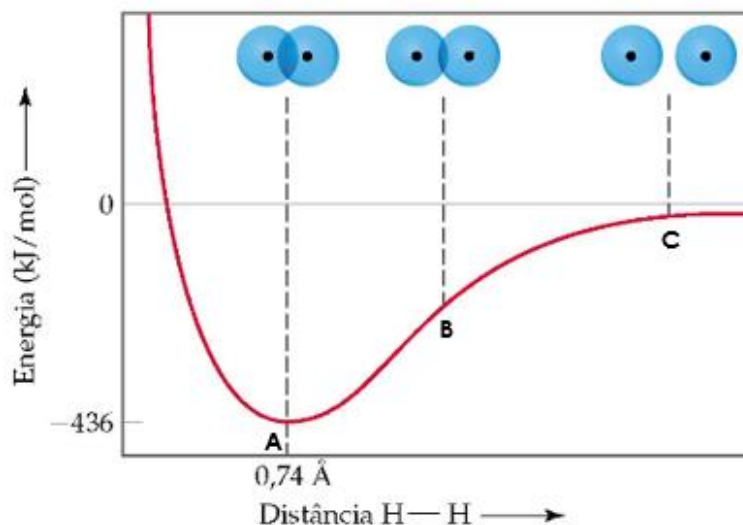


Figura 5 - Representação da sobreposição de orbitais atômicos em relação a energia potencial.

Fonte: Obra dos autores.

Conforme explicam Pereira *et al.*, (2017), John Slater e Linus Pauling aprofundariam os estudos de ligação por meio da mecânica quântica, tornando o modelo da TLV como o mais requisitado com o intuito de descrever as ligações químicas, em especial a presente no di-hidrogênio. Segundo Sutcliffe (1996), Linus Pauling combinou as ideias de ligação química por pares eletrônicos de Lewis junto ao desenvolvimento matemático de Heitler e London com as funções de onda para sugerir o modelo da sobreposição de orbitais. Além do modelo da hibridização para a explicação de moléculas, exemplificado para a molécula de metano na **Figura 6**, Pauling sugeriu o fenômeno da ressonância entre pares eletrônicos ilustrado na **Figura 4** (SUTCLIFFE, 1996). A ressonância e a hibridização tornaram-se modelos auxiliares à TLV na tratativa de moléculas, apoiando o entendimento do comprimento e formação de ligação.

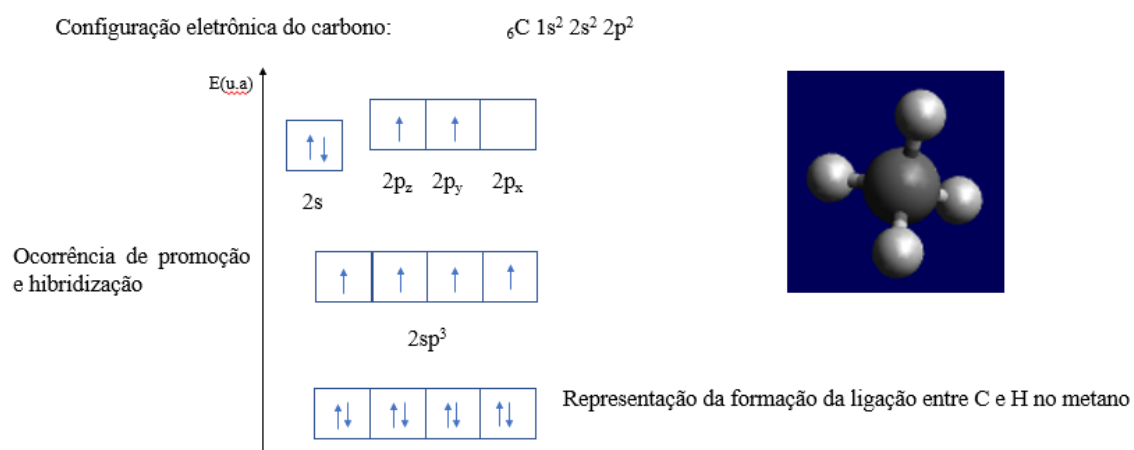


Figura 6 - Ilustração do modelo de ressonância para a molécula CH_4 .

Fonte: Obra dos autores.

A TLV descreveria as ligações químicas com um rigor matemático razoavelmente simples, em que as funções de onda assumem um papel químico de combinação de estruturas (Pereira *et al.*, 2017). A formação da ligação ocorre a partir da sobreposição de orbitais atômicos das camadas de valência dos átomos envolvidos. Quando combinada com a Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência ambas se complementam na descrição da geometria molecular e de ligações químicas. A geometria molecular do di-oxigênio, por exemplo, é dada com a TLV enquanto a geometria do metano (CH_4) necessita do uso da hibridização como modelo complementar para o entendimento do número de ligações químicas e, por conseguinte, permitir a determinação do arranjo espacial dos átomos.

Apesar da relativa simplicidade do tratamento mecânico quântico dado ao conceito de ligação química como par eletrônico, casos de moléculas com compartilhamento de um elétron entre os núcleos não são explicados com facilidade pela teoria. Assim, a estabilidade de moléculas como o óxido nítrico e o dióxido de nitrogênio é tratada por outro modelo de ligação – a TOM. Mesmo em moléculas com número par de elétrons em ligações, como o ozônio (O_3), a TLV recorre a outro modelo que, no caso, é a ressonância para sugerir a explicação dos comprimentos das ligações.

O foco na região internuclear dos pares de elétrons responsáveis pela ligação química evidencia a importância de explicar a estabilidade da molécula, minimizando as outras regiões de ligação tratadas como idênticas ao átomo de origem. Além disso, ao se basear no par

eletrônico como condição de estabilidade, o modelo enfrenta dificuldade em tratar fenômenos de estado excitado como a absorção e emissão de energia eletrônica.

Com base no modelo do par eletrônico de Lewis, a TLV apresenta as moléculas conforme a representação de traços. Logo, para o di-oxigênio, se espera a formação da dupla ligação entre os oxigênios e a distribuição de quatro pares de elétrons isolados na espécie. Pelo tratamento da TLV essa molécula seria classificada como diamagnética, ou seja, apresenta resposta repulsiva a aproximação de um campo magnético externo. Entretanto, experimentos indicam o oposto, classificando o O_2 como uma molécula paramagnética por conta da atração frente a exposição ao campo magnético. A classificação errônea de espécies como diamagnéticas ou paramagnéticas consta como mais uma das limitações da TLV que foi um modelo bastante utilizado até meados da década de 1950 quando a Teoria do Orbital Molecular (TOM) passou a ser observada como a mais vantajosa entre elas devido as inconsistências da sua antecessora. Ademais, a TLV não era facilmente aplicada a sistemas moleculares complexos, apresentando dificuldades nos cálculos computacionais tornando-se relativamente restrita a moléculas mais simples.

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) foi elaborada por contribuições, principalmente, de Robert Sanderson Mulliken, Friedrich Hund, John Lennard-Jones e Edward Condon a partir de registros publicados em 1926 (Murrell, 2011). Tendo como ideia central a distribuição dos elétrons pelos orbitais moleculares, a TOM funciona como um modelo que permite ampliar o entendimento sobre ligações químicas. Os orbitais moleculares gerados através de um método denominado Combinação Linear dos Orbitais Atômicos (CLOA) surgiu apenas na TOM, facilitando o entendimento de moléculas de maior extensão e trazendo a oportunidade de deslocalizar os elétrons da ligação contrapondo a maneira como essa é tratada na TLV. Para a TOM, a ligação química não se restringe a um par eletrônico compartilhado entre núcleos atômicos, pois os elétrons de origem nos orbitais atômicos pertencem aos orbitais moleculares ao serem distribuídos por toda a molécula. Consequentemente, esse modelo permite trabalhar com sistemas com número ímpar de elétrons sem perder a estabilidade. A distribuição dos elétrons por orbitais moleculares reverbera na organização em energia dos orbitais que será discutida em momento oportuno.

Hund (**Figura 7**), trabalhou com a espectroscopia propondo regras importantes para a descrição de átomos e moléculas, como a descrição de termos dos quatro números quânticos. A busca pelo entendimento dos espectros eletrônicos moleculares esteve voltada com o interesse de estudo da própria TOM. A dedicação do físico alemão aos espectros foi um ponto importante na concepção do cientista de que os elétrons circundam ambos os núcleos presentes

em uma molécula. Isso é primordial para a definição de orbital na TOM e sua distinção da TLV. Para a TLV os elétrons estão associados a orbitais centrados em cada átomo, sendo que a estabilidade é alcançada por meio da troca de elétrons esses orbitais. Enquanto, a compreensão de que os elétrons circundam os núcleos permitiu a distribuição dessas cargas negativas por toda a molécula.



Figura 7 - Friedrich Hund.

Fonte: GARRITZ (2014).

Em tempo próximo, Mulliken (**Figura 8**), também trabalhou com espectroscopia e usou a antiga teoria quântica para interpretar espectros de moléculas diatômicas. O químico norte-americano observou semelhanças entre alguns espectros e reconheceu o desenvolvimento da velha teoria quântica com as contribuições de Hund como fundamentais para a compreensão de estruturas moleculares, conforme explica Murrell (2011). O trabalho de Mulliken e Hund permitiu correlacionar os estados de uma molécula diatômica observando a união e separação dos átomos constituintes e, posteriormente, Mulliken introduziu a nova mecânica quântica no estudo de moléculas poliatômicas.



Figura 8 - Robert Sanderson Mulliken.

Fonte: GARRITZ (2014).

Outra contribuição relevante de Mulliken foi a própria definição de orbital como uma função de onda para um elétron de um átomo ou molécula (Murrell, 2011). Ademais, classificou os orbitais como ligantes, antiligantes e não ligantes, algo característico da TOM. Segundo Murrell (2011), Mulliken seguiu Herzberg no pensamento que se traduziu na ordem de ligação (MURRELL, 2011). A ordem de ligação corresponde à metade da diferença do número de elétrons em orbitais ligantes e antiligantes, suprimindo informações quanto a existência e estabilidade de ligações (Murrell, 2011). A noção da ligação química da TOM advém da deslocalização desses orbitais moleculares sobre toda a molécula.

Um método comumente utilizado no tratamento das funções de onda na TOM consiste na Combinação Linear dos Orbitais Atômicos (CLOA). Essa combinação linear parte de uma proposta de representar um orbital molecular para um elétron através da expansão em termos de funções específicas das quais uma função de onda é definida pelo conjunto de coeficientes dessas funções (Murrell, 2011). O conjunto de funções de onda mais comum para a expansão são aquelas funções centradas em átomos da molécula usando a prerrogativa de núcleo parado (Murrell, 2011). As funções de onda obtidas para a molécula devem ser parecidas com as funções de onda do átomo e esse método de combinação dos orbitais atômicos é o que permite obter os orbitais moleculares. Murrell (2011) destaca que Bloch construiu funções de onda para metais com os coeficientes de expansão determinados por periodicidade da rede, mas foi o matemático inglês John Edward Lennard-Jones, (**Figura 9**), quem utilizou a CLOA de maneira similar à de hoje. Lennard-Jones também notou que a teoria de Heitler e London para o paramagnetismo do di-oxigênio não atendia aos resultados encontrados.



Figura 9 - John Edward Lennard-Jones.

Fonte: Adaptado de <https://royalsocietypublishing.org/>. Acesso em 17 fev. 2024.

Lennard-Jones organizou matematicamente um conjunto de funções de onda monoelétrônicas – orbitais moleculares – levando em consideração o mesmo agrupamento de números quânticos (n, l, m) para a soma e a diferença das funções de onda conforme a (Equação 14) (Murrell, 2011).

$$\psi(\pm) = \{\phi a(nlm) \pm (nlm)\} \{2(1 \pm S)\}^{-1/2} \quad (\text{Equação 14})$$

Em que S corresponde a integral de recobrimento entre dois orbitais atômicos. O matemático usou uma classificação em que $2s\sigma$ e $2s\sigma'$ identificam os dois orbitais moleculares que se dissociaram dos orbitais $2s$ dos átomos separados. Lennard-Jones determinou as energias dessas funções por alguns métodos, dentre eles o de Heitler e London. Além disso, o cientista calculou as energias dos orbitais moleculares de Li_2 a F_2 como função da distância internuclear e as organizou por meio de diagramas. Nos diagramas, as energias dos orbitais atômicos conduzem as interações que ditam a disposição energética dos orbitais moleculares, produzindo os ligantes e antiligantes. A estruturação do diagrama segue um arranjo em que o orbital molecular ligante possui energia inferior aos orbitais atômicos enquanto o orbital molecular antiligante apresenta energia superior, sendo deslocado acima dos orbitais de origem. Lennard-Jones colaborou com o entendimento dos orbitais moleculares deslocalizados, já mencionados por Mulliken, através de determinantes (Murrell, 2011).

Os orbitais moleculares da espécie H_2 foram calculados, primeiramente, por Edward Condon, (**Figura 10**), no artigo intitulado “*The normal State of the Hydrogen Molecule*”.

Condon atribuiu dois elétrons ao orbital da espécie H^+ e retificou a energia eletrônica de Burrau através de uma correção para a repulsão eletrostática entre os elétrons, obtendo o valor da energia de ligação e da distância internuclear de H_2 segundo Murrell (2011).



Figura 10 - Edward Condon.

Fonte: Disponível em <https://history.aip.org/phn/11404002.html>. Acesso em 17 fev. 2024.

A historização da Ciência constitui uma reconstrução de fatos e contribuições científicas conforme explica Martins (2005). Recorre-se a esse processo, dentre tantos motivos, para conhecer os fatores científicos relacionados a determinado assunto. Outra abordagem bastante comum consiste no estudo das condições extra científicas como as influências políticas, sociais, econômicas, entre outras, para o estudo daquela época. Isso permite uma maior aproximação dos estudantes em relação a Ciência a partir da humanização dessa e dos cientistas. O trabalho científico também é questionado, desmistificando a ideia de gênios alheios a um contexto promovendo indagações sobre os papéis assumidos pelos cientistas na sociedade como também sobre a coleta de informações, as observações e imprecisões experimentais. Consequentemente, há uma maior compreensão sobre a ética e a não neutralidade da Ciência.

O recorte apresentado nesta seção objetiva aproximar os estudantes da Ciência e dos cientistas, relacionando seus trabalhos de forma interligada – o que promoveu de forma conjunta a elaboração de teorias de ligação química, como a TOM. Outrossim, é interessante destacar as relações entre os cientistas como exemplificado através da animosidade de Lewis em relação a Langmuir por conta da ligação química, evidenciando uma relação possível entre pares na comunidade científica. Ademais, se destaca a pausa feita por Lewis em seus trabalhos para se dedicar a auxiliar o governo norte-americano na I Guerra evidenciando o contexto político-social da época. Também se destaca a modelagem como um processo humano e de

reconstrução como na mudança de abordagem da ligação química por meio das teorias de Lewis, TLV e TOM ou ainda na interpretação da natureza do elétron.

4.4 A Teoria do Orbital Molecular (TOM)

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) constitui um modelo de ligação química, sendo que as simetrias e as energias relativas dos orbitais atômicos contribuem no entendimento da formação dos orbitais moleculares. A aplicação de propriedades de simetria costuma, geralmente, aparecer aliada aos sistemas moleculares com maior complexidade enquanto uma abordagem menos rigorosa atende a descrição de outras tantas moléculas mais simples (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

E o que são os orbitais moleculares?

Os orbitais moleculares são semelhantes aos orbitais atômicos, sendo policêntricos em relação aos núcleos de origem (Barros, 1992). Cada elétron presente em uma molécula é descrito por uma função de onda (Ψ) que sirva como resolução da Equação de Schrödinger. Essas funções de onda podem ser combinadas matematicamente de maneira aproximada através do método da Combinação Linear de Orbitais Atômicos (CLOA), (Barros, 1992). Dessa combinação surgem os orbitais moleculares derivados da superposição de orbitais que constitui um fenômeno de interferência.

A superposição de orbitais pode ser compreendida de modo análogo ao da superposição de ondas (Barros, 1992). Logo, supondo que $\Psi_{1s(A)}$ representa uma função de onda para um orbital 1s de um átomo genérico A e que $\Psi_{1s(B)}$ corresponda a função de onda similar para um átomo genérico B, a maneira com que ambas podem se combinar construtivamente é ilustrada na (**Figura 11**) considerando a função radial (R_{nl}). Na **Figura 11 (a)**, é representada a combinação de orbitais atômicos em fase ns resultando em um orbital que não contém plano nodal. A escolha do sinal de fase para as funções de onda é arbitrária. A interferência construtiva é responsável pelo aumento de densidade eletrônica entre os núcleos que conduz a formação de um orbital molecular ligante, conforme as representações **b** e **c** da **Figura 11**. Na **Figura 11 (b)** ocorre o fenômeno de interferência entre as funções radiais representativas de átomos descritos por n e l equivalentes a 1 e 0, respectivamente. A distância entre os núcleos no eixo de orientação z (R_{ab}) corresponde a $2,12a_0$, em que a_0 expressa o raio atômico de Bohr. A **Figura 11 (c)**, ilustra o reforço de densidade eletrônica internuclear a partir da combinação de funções radiais para os átomos genéricos A e B.

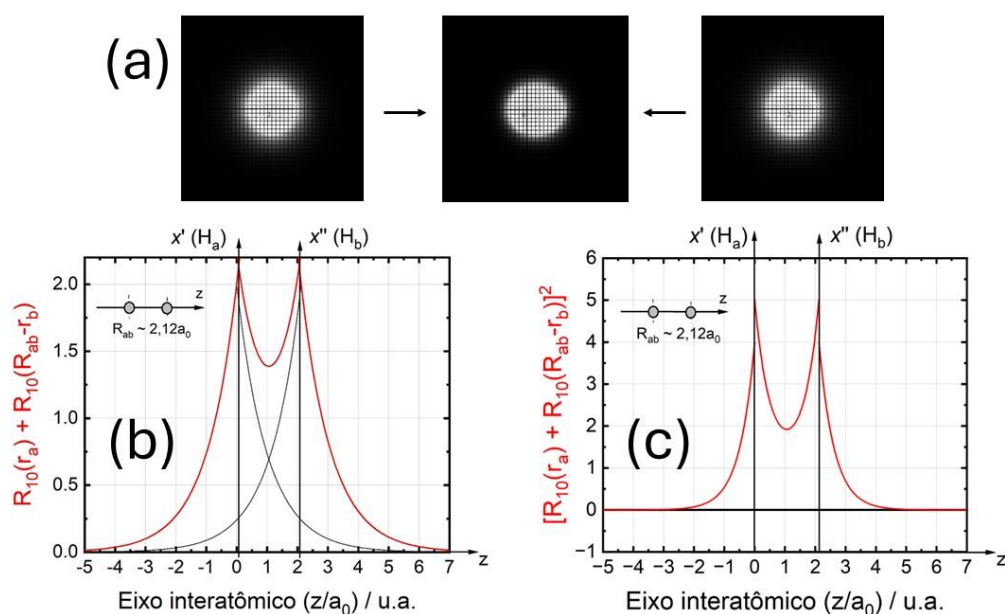


Figura 11 - Representações gráficas do fenômeno de interferência construtiva entre duas funções de onda genéricas - $\Psi_{1s}(A)$ e $\Psi_{1s}(B)$ - representadas pela parte radial (R_{nl}) a) Aproximação dos orbitais s. b) Aumento da interação entre as funções de onda, em fase, características dos orbitais s. c) Interferência construtiva e aumento da densidade nuclear entre as funções de onda representativas da parte radial.

Fonte: Obra dos autores.

Entretanto, há também a interferência destrutiva a se considerar entre os orbitais atômicos em combinação linear, o que ocorre a partir da combinação de orbitais atômicos fora de fase entre si **Figura 12 (a)**. Essa combinação gera uma região sem qualquer probabilidade de encontro dos elétrons entre os núcleos conhecida como plano nodal que pode ser observada nas representações das **Figura 12 (a)** e **Figura 12 (c)** que denotam o fenômeno de interferência destrutiva entre as funções radiais representativas de átomos descritos por n e l equivalentes a 1 e 0, respectivamente. A **Figura 12 (b)** ilustra a combinação fora de fase entre os núcleos dos átomos A e B separados por uma distância de $2,12a_0$. Para a formação de um orbital molecular com essas características, conhecido como Orbital Molecular Antiligante (OMAL), se utiliza o símbolo (*) em sua denotação conforme menciona Barros (1992).

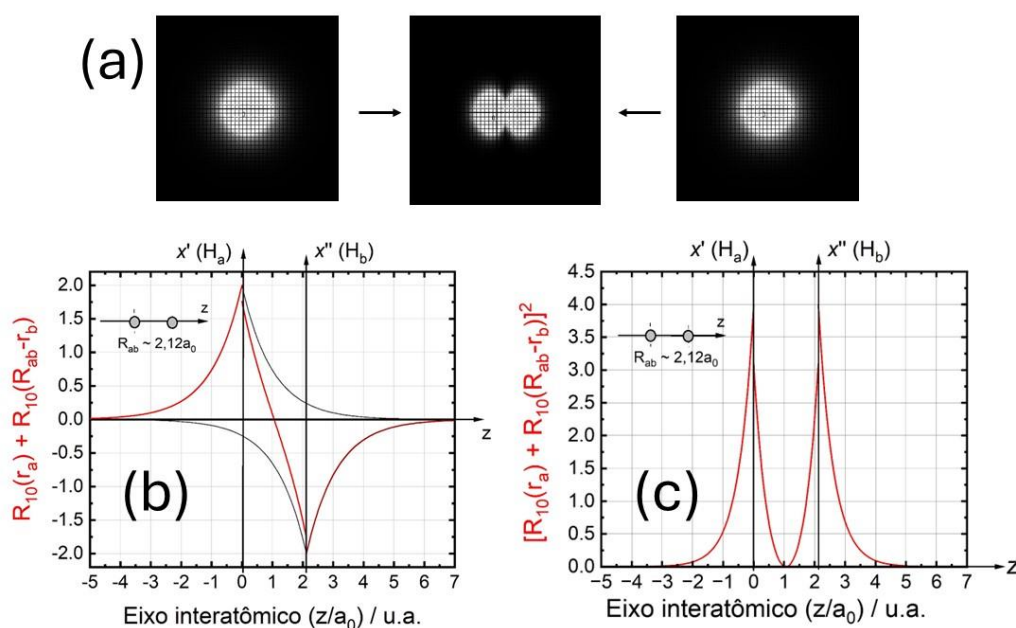


Figura 12 - Representação gráfica da redução de densidade nuclear entre os átomos A e B, para duas funções de onda genéricas - $\Psi_{1s}(A)$ e $\Psi_{1s}(B)$ - representadas pela parte radial (R_{nl}) a) Aproximação dos orbitais s e formação de plano nodal b) Formação de um plano nodal internuclear a partir da superposição de orbitais fora de fase c) Interferência construtiva entre as funções de onda representativas da parte radial.

Fonte: Obra dos autores.

Outra maneira de expressar a combinação de orbitais atômicos consiste no modelo de expressão matemática através das equações. Considerando, Ψ_A e Ψ_B como funções de onda que descrevem o comportamento dos átomos A e B, respectivamente, e C_A e C_B como os coeficientes quantitativos da contribuição de cada orbital atômico de um átomo A e um átomo B para o orbital molecular de função Ψ , tem-se que para uma molécula diatômica AB a expressão matemática simplificada consiste no apresentado pela (Equação 15) conforme exposto por Miessler; Fischer e Tarr (2014).

$$\psi = c_A \psi_A + c_B \psi_B \quad (\text{Equação 15})$$

Os coeficientes (C) podem ser iguais ao se tratar de átomos idênticos ou desiguais para átomos distintos, refletindo as energias dos orbitais. À medida que os átomos A e B se aproximam, os orbitais atômicos que lhes são característicos se sobrepõem, promovendo a

diminuição da energia potencial total do sistema ao se considerar que essa combinação reflete a interferência construtiva das funções de onda (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Mediante a combinação, a probabilidade de os elétrons serem detectados na região comum de sobreposição é significativa, refletindo uma ideia bastante característica da Teoria do Orbital Molecular (TOM): os elétrons pertencem a molécula. Portanto, os orbitais moleculares são o resultado da combinação linear dos orbitais atômicos conforme a ocupação eletrônica dada na região de sobreposição.

A formação dos orbitais moleculares por meio da Combinação Linear dos Orbitais Atômicos (CLOA) é amparada por algumas condições conforme explicam Miessler, Fischer e Tarr (2014). Considerando que a CLOA surge a partir da aproximação de orbitais atômicos, espera-se que para haver uma sobreposição efetiva entre os orbitais atômicos deve haver um equilíbrio entre as forças eletrostáticas com a distância ótima para a sobreposição. Assim, as forças atrativas e repulsivas junto a distância internuclear cerceiam uma das condições para essa combinação (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Outra condição diz respeito à energia dos orbitais atômicos sujeitos a sobreposição. Cada orbital atômico possui uma energia vinculada e, caso essa diferença de energia seja quantitativamente diferente, não haverá redução significativa da energia dos orbitais moleculares para formação da ligação química. E, além disso, a simetria dos orbitais atômicos deve permitir com que regiões de mesma fase estejam aptas a sobreposição. Se essas condições forem atendidas, a energia total dos elétrons nos orbitais moleculares ocupados é inferior em relação a energia total dos elétrons nos orbitais de origem – os orbitais atômicos de acordo com Miessler, Fischer e Tarr (2014). Consequentemente, se os orbitais moleculares possuem energia inferior aos orbitais atômicos, a formação da molécula é beneficiada (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

Tomando como exemplo simples para a ilustração da Combinação Linear dos Orbitais Atômicos (CLOA) a molécula de di-hidrogênio (H_2), se pode descrever os orbitais moleculares a partir da interferência construtiva em que há reforço da densidade eletrônica em certa região do espaço e da interferência destrutiva que cria uma região com probabilidade nula de encontro dos elétrons entre os núcleos conforme as equações a seguir. Ademais, as condições de simetria, energia próxima e o equilíbrio entre as forças eletrostáticas junto a distância internuclear garantem com que haja a combinação linear dos orbitais s de cada hidrogênio Miessler, Fischer e Tarr (2014).

Para uma interferência construtiva em que os átomos de hidrogênio H_A e H_B reforçam a densidade eletrônica em região do espaço ($H_A + H_B$) há a descrição de um orbital molecular

ligante (OML). O OML detém menor energia eletrônica quando comparado aos orbitais de origem. A descrição por modelo matemático é dada através da (Equação 16).

$$\psi(\sigma) = N. [C_A\psi(1s_A) + C_B\psi(1s_B)] \quad (\text{Equação 16})$$

Já para a interferência destrutiva que manifesta o cancelamento de funções de onda em determinada posição no espaço se representa a perda de densidade eletrônica através de um orbital molecular com maior energia em comparação aos orbitais atômicos de origem. A esse orbital molecular de maior energia e com um plano nodal que exprime a densidade eletrônica internuclear nula, dá-se o nome de Orbital Molecular Antiligante (OMAL), (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). No OMAL os elétrons estão desestabilizados por não acessarem a região internuclear de maior atração nuclear (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Logo, para os átomos de hidrogênio H_A e H_B tem-se ($H_A - H_B$) e a expressão matemática segue conforme a (Equação 17).

$$\psi(\sigma^*) = N. [C_A\psi(1s_A) - C_B\psi(1s_B)] \quad (\text{Equação 17})$$

Nas (Equação 16) e (Equação 17), N corresponde ao fator de normalização.

Como o di-hidrogênio é formado por dois átomos de hidrogênio iguais, os coeficientes de ambos são descritos em literatura como praticamente idênticos (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

Além dos modelos matemáticos que expressam os orbitais moleculares ligantes e antiligantes, há o diagrama de orbitais moleculares como representação gráfica desse modelo de ligação química. O diagrama de orbitais moleculares é feito com base na energia de todos os orbitais. Considerando uma molécula diatômica genérica AB, o diagrama de orbitais moleculares dessa entidade é organizado de modo que os orbitais atômicos de A e B sejam posicionados nos lados esquerdo e direito enquanto os orbitais moleculares são dispostos ao centro. Por sua vez, os orbitais moleculares são posicionados de modo que os ligantes apresentem energia inferior aos de origem enquanto os antiligantes sejam localizados acima devido a maior energia (**Figura 13**).

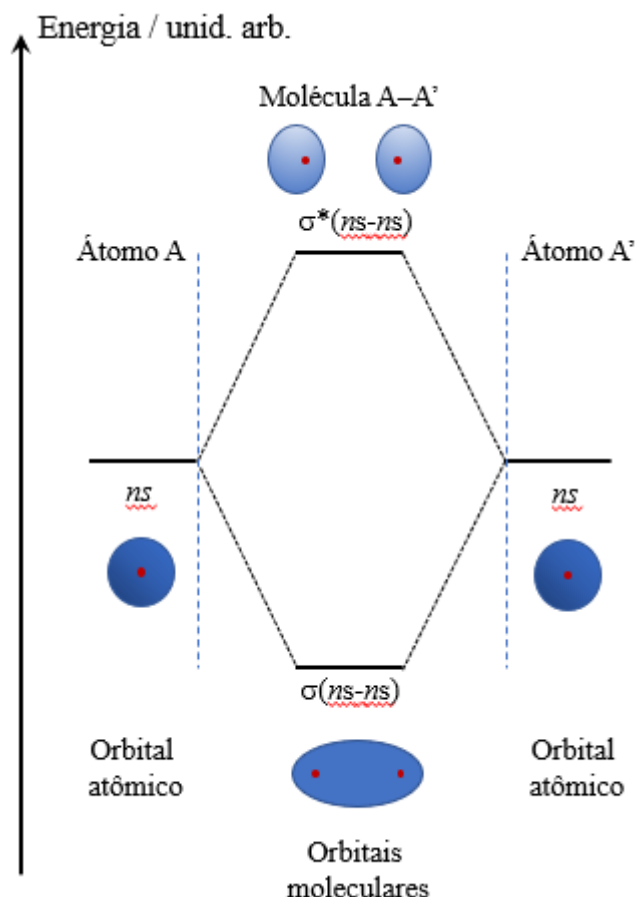


Figura 13 - Representação do diagrama de orbitais moleculares para uma entidade molecular diatômica.

Fonte: Obra dos autores.

Continuando o exemplo dado a partir do di-hidrogênio, uma molécula diatômica homonuclear, sabe-se que os elétrons estarão distribuídos pelos orbitais moleculares conforme a **Figura 14** prezando pelo atendimento ao Princípio da Máxima Multiplicidade de Friedrich Hund. Outrossim, o preenchimento dos orbitais moleculares segue o Princípio de Aufbau em que primeiramente são ocupados aqueles com menor energia para os de maior energia de maneira que em cada orbital haja até, no máximo, dois elétrons retratados por spins opostos – o que se justifica através do Princípio da Exclusão de Pauli em que as duas cargas, quanticamente, são impossibilitadas de possuírem os mesmos quatro números quânticos Miessler, Fischer e Tarr (2014). É importante destacar que o número de orbitais moleculares formados é numericamente igual ao total de orbitais atômicos nos diagramas.

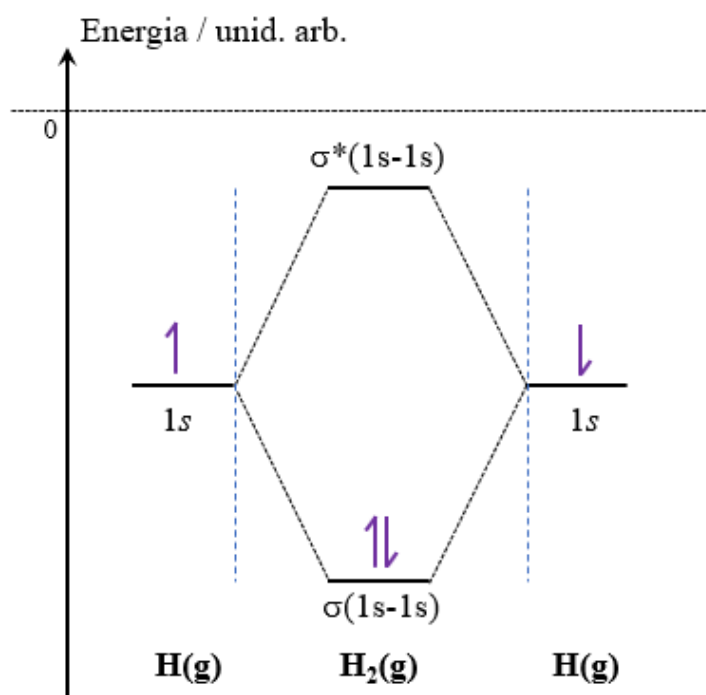


Figura 14 - Diagrama de orbitais moleculares para H_2 .

Fonte: Obra dos autores.

Através do exemplo do di-hidrogênio se nota que a sobreposição se dá com início na sobreposição de orbitais s , gerando orbitais moleculares ligantes e antiligantes (àqueles acompanhados por um “*” como complemento da denotação). A sobreposição de orbitais s é possível ao estar de acordo com a proximidade de energia ($1s-1s$), a simetria e distância de aproximação. Atendendo a essas condições, as possíveis combinações entre os orbitais $s-s$, $p-p$ e $s-p$ são dadas conforme a **Figura 15** em que a orientação em z costuma ser adotada, por convenção, como representativa do eixo internuclear. Os sinais algébricos indicam a escolha arbitrária da fase de cada orbital. Essa indicação é relevante para dar sentido físico a combinação retomando o princípio da interferência de ondas em que a combinação das ondas em fase origina orbitais moleculares ligantes enquanto da combinação das ondas fora de fase surgem orbitais moleculares antiligantes. Na **Figura 15** observa-se que nas superposições que são positivas entre os orbitais há uma fusão de lóbulos dos orbitais e o aumento da densidade eletrônica na região internuclear, porém nas superposições negativas há a diminuição de densidade eletrônica derivada do surgimento de plano nodal entre os núcleos. Esse plano nodal é situado entre os núcleos atômicos e é perpendicular ao eixo internuclear. Como destaca Barros

(1992), as regiões nodais existentes nos orbitais atômicos perduram nos orbitais moleculares. As cores diferentes para cada lóbulo retratam os sinais opostos das funções de onda.

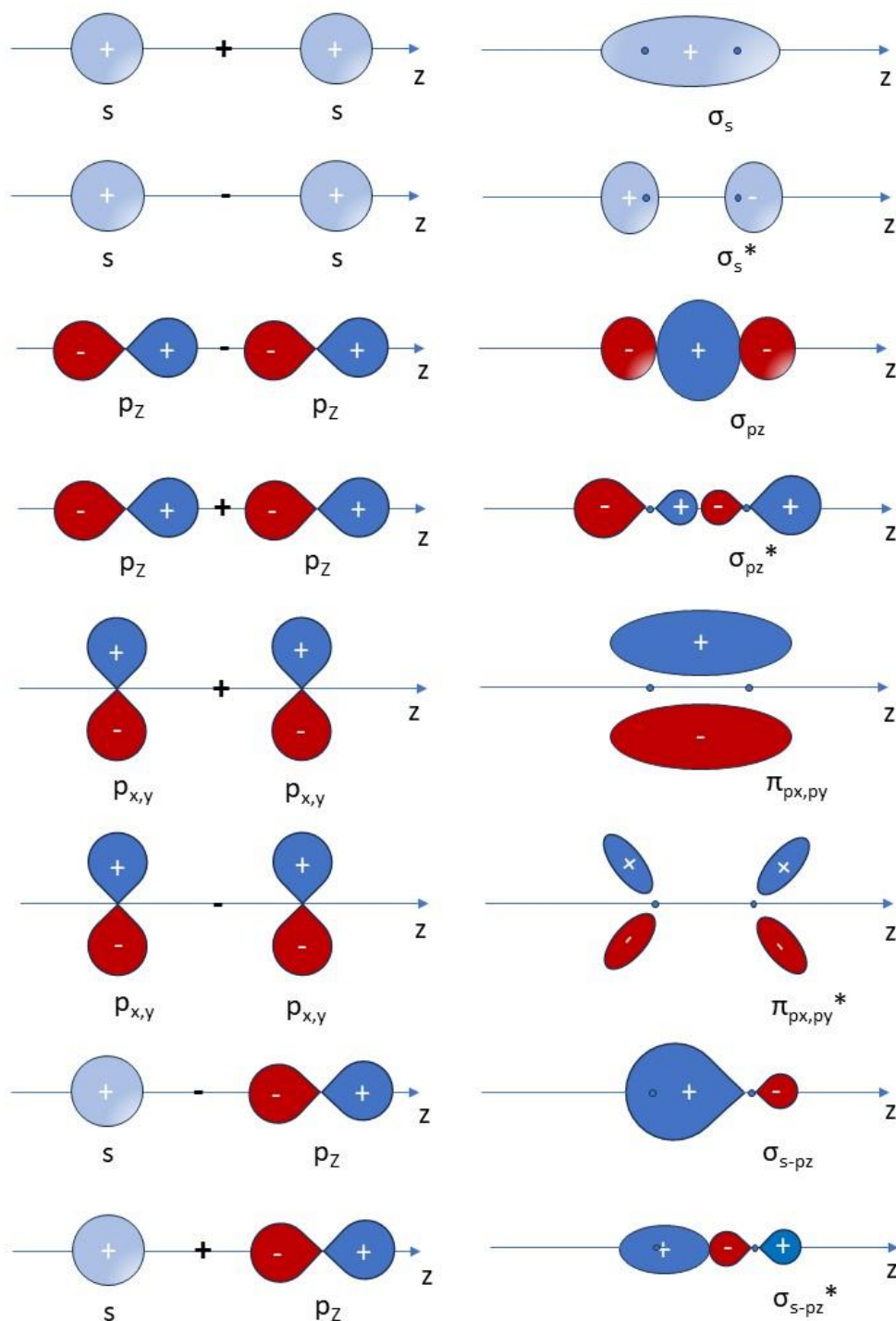


Figura 15 - Representação gráfica da sobreposição de orbitais.

Fonte: Adaptado de Barros (1992).

Das sobreposições ilustradas na **Figura 15**, nota-se que os orbitais resultantes são descritos como sigma (σ) ou pi (π). A denominação sigma é dada quando os orbitais são simétricos a rotação por um eixo que atravessa os núcleos não havendo mudança de sinal ao longo do orbital em uma rotação em torno do eixo internuclear (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Por conseguinte, a ligação sigma não apresenta um plano nodal contendo um eixo internuclear (Atkins; Jones 2012). A **Figura 16** traz um exemplo de ligação sigma a partir dos orbitais *s*. Já a denominação *pi* é dada quando os orbitais são sobrepostos lateralmente, havendo um plano nodal sobre o eixo internuclear e uma mudança de sinais ao rotacionar sobre o eixo como retratado na **Figura 17** (Atkins; Jones, 2012). A ligação *pi* possui densidade eletrônica em ambos os lados do eixo internuclear (Atkins; Jones, 2012).

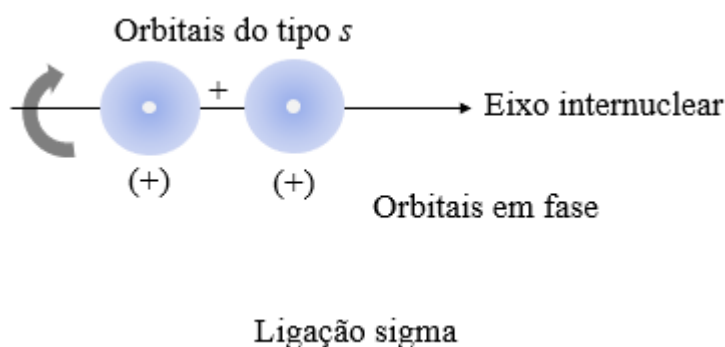


Figura 16 - Representação gráfica de uma ligação sigma a partir de dois orbitais *s*.

Fonte: Obra dos autores.

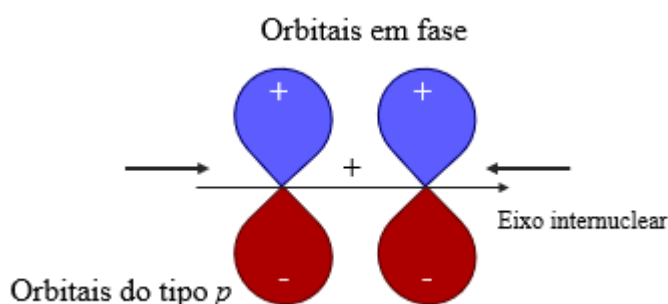


Figura 17 - Representação gráfica de uma ligação pi a partir de dois orbitais *p*.

Fonte: Obra dos autores.

Apesar de não aparecer no diagrama de orbitais moleculares do H_2 , há um outro orbital molecular: o não ligante. O Orbital Molecular Não Ligante (OMNL) é caracterizado por

apresentar energia similar aos orbitais atômicos de origem. O OMNL surge quando as condições de sobreposição para os orbitais não são respeitadas (Barros, 1992). Em vista disso, diferenças profundas de energia entre orbitais e simetrias inadequadas para sobreposição, dimanam em um OMNL. Esses orbitais costumam aparecer em moléculas diatômicas heteronucleares como, por exemplo, no fluoreto de hidrogênio em que dois orbitais p do flúor não apresentam simetria adequada para sobreposição junto ao orbital s do hidrogênio conforme explica Barros (1992). Abaixo, a **Figura 18** ilustra alguns orbitais não ligantes.

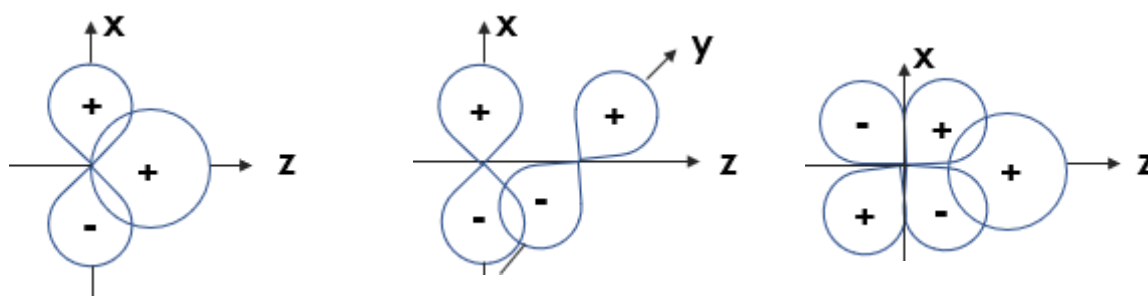


Figura 18 - Exemplos representativos de combinações não ligantes entre orbitais.

Fonte: Obra dos autores.

4.4.1 Nomenclatura dos orbitais moleculares

Há outra maneira de nomear os orbitais moleculares ligantes σ e π , antiligantes σ^* e π^* e não ligantes nos diagramas além da designação $\sigma(ns-ns)$, $\sigma^*(ns-ns)$, $\sigma(np-np)$, $\sigma^*(np-np)$, $\pi(np-np)$, $\pi^*(np-np)$, entre outros (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Essa forma se baseia no centro de inversão da molécula. Quando os orbitais atômicos que dão origem a molécula são simétricos a inversão, se utiliza a letra g junto a ligação σ ou π . A letra g corresponde a palavra *gerade* que em alemão significa par, assim são descritos aqueles orbitais simétricos à inversão, apresentando os mesmos sinais de fase ao atravessar o centro de inversão. Porém, quando os orbitais atômicos que compõem a molécula forem antissimétricos ao centro de inversão, indicando os sinais de fase opostos, dar-se a nomeação como u (*ungerade*) que significa ímpar (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). As designações u e g são ilustradas através da **Figura 19**.

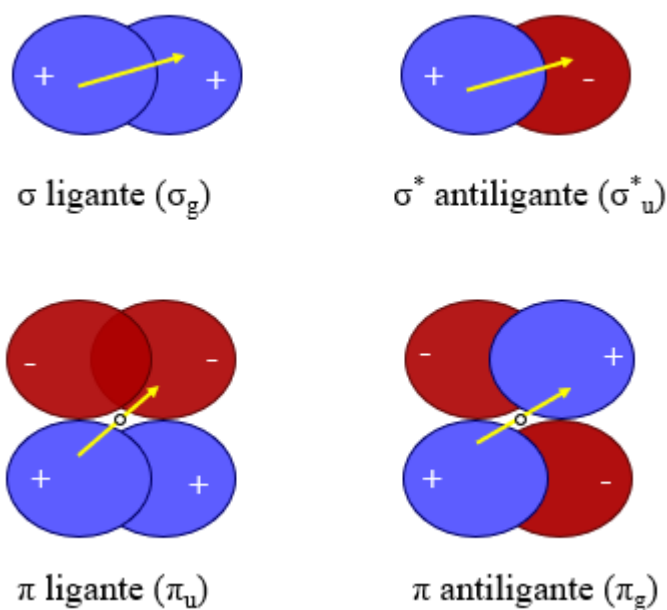


Figura 19 - Designação dos orbitais através do sistema g - u.

Fonte: Adaptado de SHRIVER *et al.* (2008).

4.4.2 Diagramas de orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares do segundo período da tabela periódica – He₂ a N₂.

As moléculas diatômicas homonucleares apresentam orbitais atômicos com energias idênticas, logo os orbitais moleculares possuirão igual contribuição de cada átomo. A ocupação dos orbitais moleculares segue os princípios citados anteriormente (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Desse modo, a distribuição eletrônica avança de forma consecutiva até o preenchimento completo da camada de valência do neônio – último elemento químico do segundo período da tabela periódica.

Após o diagrama de orbitais moleculares do H₂, se encontra o modelo aplicado para o di-hélio com um aspecto interessante: a completa ocupação dos orbitais moleculares σ ligante e σ^* antiligante – (**Figura 20**).

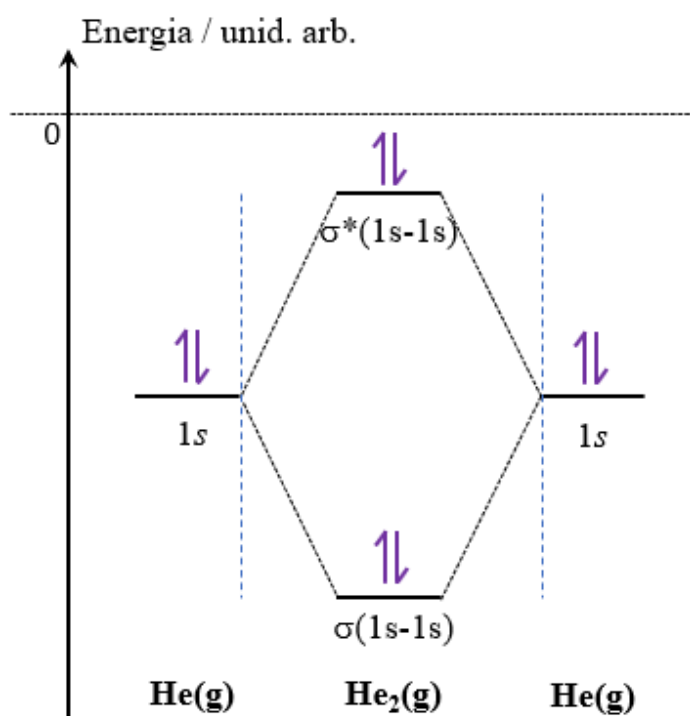


Figura 20 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para He_2 .

Fonte: Obra dos autores.

O diagrama do orbital molecular auxilia a interpretar que a molécula de H_2 deve existir enquanto a de He_2 é inexistente. Isso porque a distribuição dos elétrons pela molécula indica que a ligação é formada num orbital de menor energia no caso do di-hidrogênio, enquanto para o di-hélio ambos os orbitais moleculares ligantes e antiligantes são completamente preenchidos, assim a redução de energia com o preenchimento do orbital molecular ligante é compensada pelo aumento de energia com a ocupação do orbital molecular antiligante. Essa percepção também é vista por meio do cálculo da ordem de ligação conforme retratado na (Equação 18). Entretanto, a espécie He_2^+ existe e pode ser confirmada através da ordem de ligação. A ordem de ligação consiste em uma relação entre orbitais moleculares ligantes (OML) e antiligantes (OMAL), ou seja, aqueles que, realmente, podem ser estabelecidos a partir das condições já mencionadas. Uma ordem de ligação nula indica que não há ligação química; uma ordem de ligação igual a 1 aponta que a entidade molecular apresenta uma ligação simples; ordem de ligação equivalente a 2 reflete uma dupla ligação enquanto um resultado 3 infere uma tripla ligação.

$$OL = \frac{n^\circ \text{ de elétrons nos OMLs ligantes} - n^\circ \text{ de elétrons nos OMLs antiligantes}}{2} \quad (\text{Equação 18})$$

Para o di-hélio a aplicação do cálculo da ordem de ligação traz um resultado equivalente a zero, apontando para sua inexistência conforme a (Equação 19).

$$OL(He_2) = \frac{2-2}{2} = 0 \quad (\text{Equação 19})$$

Como a Teoria do Orbital Molecular (TOM) considera todas as combinações de orbitais atômicos permitidos e distribui os elétrons pelos orbitais moleculares, a ocupação de um maior número de orbitais moleculares ligantes, corresponde a uma melhor estabilização da molécula, e conseqüentemente, a formação de ligações químicas é favorecida – como mostrado para o di-hidrogênio anteriormente. O mesmo cálculo dado pela (Equação 18), quando aplicado ao He_2 , resulta em uma ordem de ligação numericamente igual a 1 o que corresponde a formação de uma ligação simples.

Prosseguindo ao longo do segundo período, a espécie Li_2 deve existir pela ocupação do orbital molecular ligante $\sigma 2s$. Aqui, os orbitais $2s$ e $2p$ formam a camada de valência, sendo representados como orbitais atômicos de maior energia em comparação com o antecessor – $1s$. Por conseguinte, o diagrama acompanha essa mudança, posicionando a nova camada de valência em um maior nível de energia. Os elétrons mais internos – àqueles que ocupam os orbitais $1s$ - não contribuem de forma tão significativa quanto os da camada de valência para a formação de ligação. O diagrama de orbitais moleculares para a espécie é retratada a seguir na **Figura 21**.

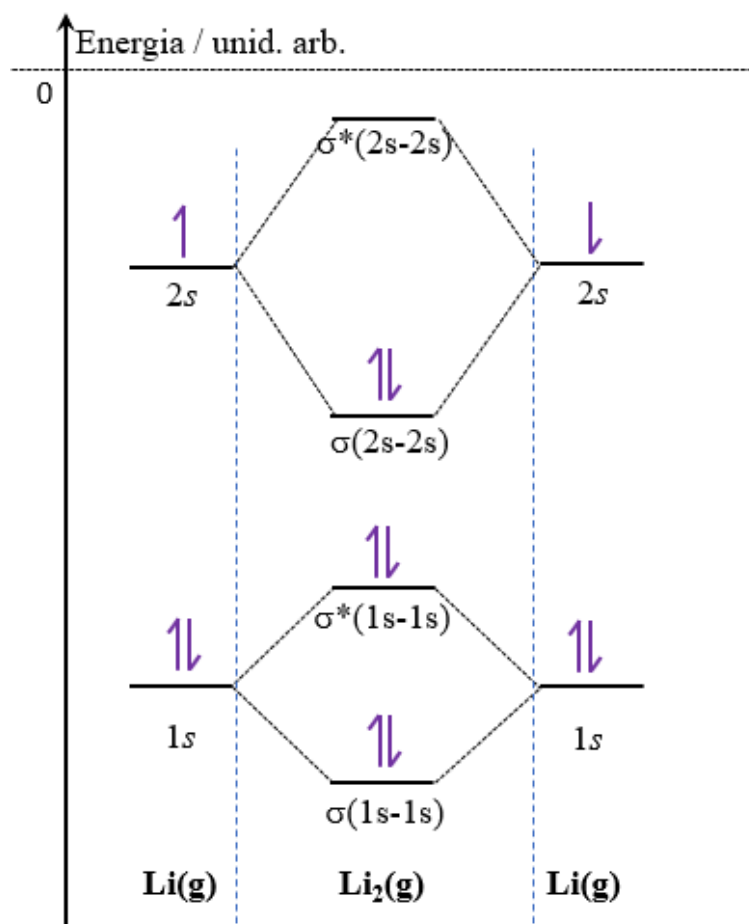


Figura 21 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para Li_2 .

Fonte: Obra dos autores.

Apenas a observação do diagrama de orbitais moleculares para o Li_2 (**Figura 21**) já permite concluir que a molécula pode ser formada, mesmo que em condições específicas, afinal a ocupação igualitária dos orbitais moleculares internos ($1s$) não favorece energeticamente o estabelecimento de uma ligação. Esses elétrons, inclusive, são descritos como mais próximos dos átomos que lhes deram origem que participantes ativos da ligação. Todavia, a ocupação do orbital molecular ligante $\sigma(2s-2s)$ corrobora na estabilização de uma ligação entre dois átomos de lítio em fase gasosa.

A determinação da ordem de ligação traz a confirmação como demonstrado na (Equação 20).

$$OL(\text{Li}_2) = \frac{4-2}{2} = 1 \quad (\text{Equação 20})$$

Assim como ocorreu com o di-hélio, o berílio não apresenta a formação de molécula diatômica entre seus átomos, pois há o completo preenchimento dos orbitais ligantes e antiligantes – (**Figura 22**).

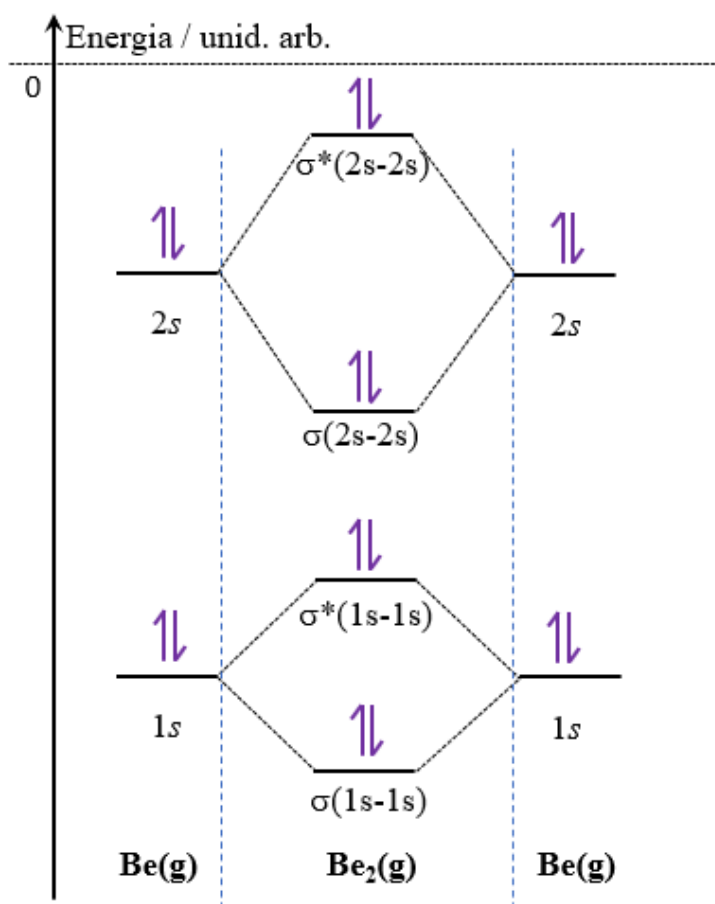


Figura 22 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para Be_2 .

Fonte: Obra dos autores.

Com o boro há o início da sobreposição de orbitais p que assim como os orbitais s dão origem a orbitais moleculares ligantes e antiligantes. Dessa forma, o preenchimento do diagrama de orbitais moleculares avançará sobre os orbitais p e continuará seguindo os mesmos princípios citados anteriormente – (**Figura 23**). Orbitais p degenerados farão parte dos orbitais moleculares. O B_2 é uma espécie em fase gasosa e voltará a ser discutido junto ao O_2 .

Para os átomos boro, carbono e nitrogênio a ordem de preenchimento dos orbitais moleculares segue o caminho:

$$\sigma 1s, \sigma^* 1s, \sigma 2s, \sigma^* 2s, \left\{ \begin{matrix} \pi 2px \\ \pi 2py \end{matrix} \right\}, \sigma 2pz, \sigma^* 2pz, \left\{ \begin{matrix} \pi^* 2px \\ \pi^* 2py \end{matrix} \right\}$$

Se cada átomo de boro contém 5 elétrons, então há um total de 10 elétrons distribuídos pelos orbitais moleculares, logo:

$$\sigma 1s^2, \sigma^* 1s^2, \sigma 2s^2, \sigma^* 2s^2, \left\{ \pi 2p^1 x \right\}$$

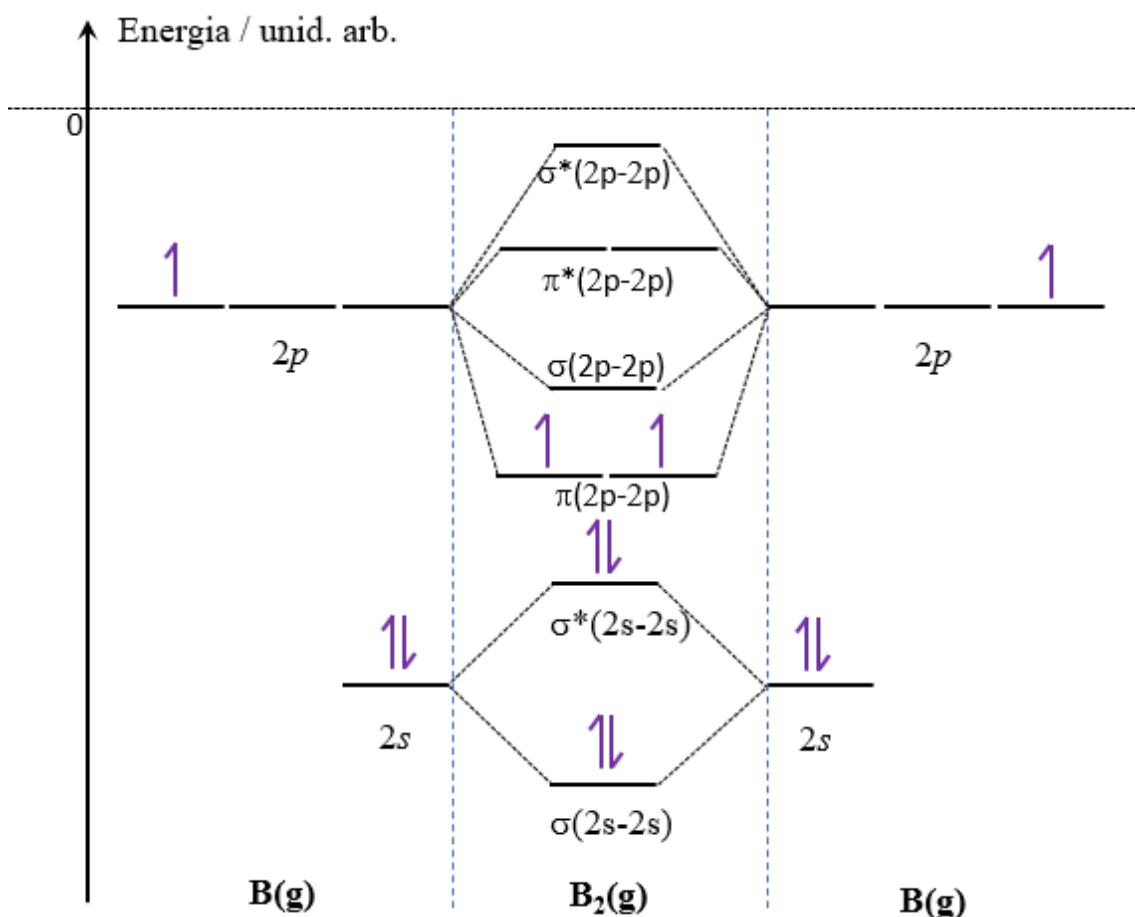


Figura 23 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para B₂.

Fonte: Obra dos autores.

O preenchimento da molécula de carbono segue a ordem seguida pelo boro. O orbital da molécula C₂ deverá contar com um total de 12 elétrons, já que cada carbono contém 6 elétrons e o preenchimento dos orbitais $\pi 2p_x$ e $\pi 2p_y$ será completo – (**Figura 24**).

$$\sigma 1s^2, \sigma^* 1s^2, \sigma 2s^2, \sigma^* 2s^2, \left\{ \pi 2p^2 x \right\}$$

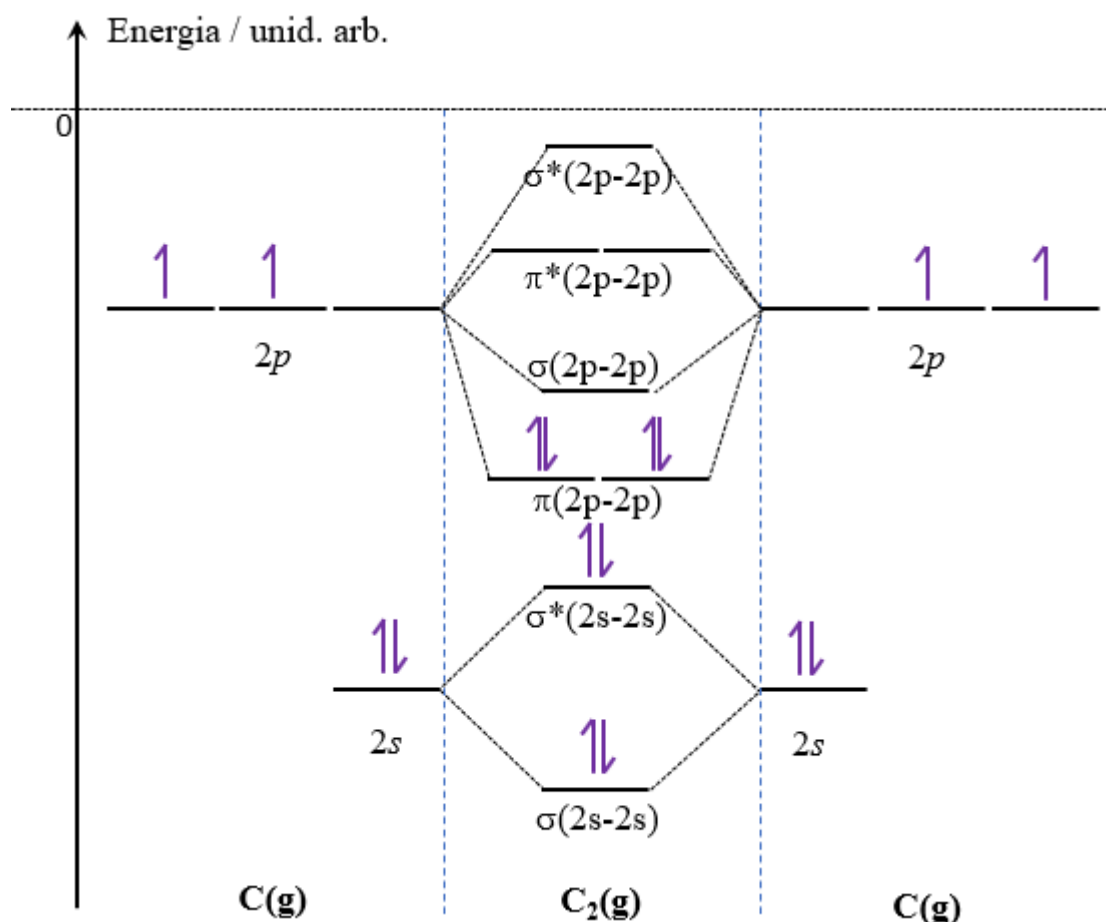


Figura 24 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para C_2 .

Fonte: Obra dos autores.

Os próximos dois diagramas, N_2 (**Figura 25**) e O_2 (**Figura 29**), apresentam uma peculiaridade: uma inversão de orbitais moleculares conhecida como inversão sigma-pi. Nesse momento é importante destacar o comportamento das energias dos orbitais atômicos ao longo do segundo período. Percebe-se pela (**Figura 26**) que as energias dos orbitais atômicos diminuem no decorrer do aumento do número atômico (Z). Assim, a espécie Li_2 aparece com os mais altos valores energéticos para cada orbital enquanto o Ne_2 possui valores consideravelmente inferiores. Os orbitais atômicos possuem menor energia com o aumento da carga nuclear efetiva (Z^*). Conforme explicam Atkins e Jones (2012), a carga nuclear efetiva é caracterizada como a carga nuclear experimentada por um elétron. A carga nuclear efetiva é menor que a carga nuclear real devido as repulsões eletrônicas que minimizam a atração do núcleo sob um elétron.

A irregularidade quantitativa da mudança energética entre os níveis dos orbitais para cada átomo decorre devido ao efeito de blindagem. Na blindagem os elétrons mais internos blindam a atuação eletrostática do núcleo sob os elétrons externos, consequentemente, esses últimos experimentam uma carga nuclear efetiva menor que a pertencente ao átomo.

Por conta da blindagem e dos efeitos a ela associados – interações elétron-elétron e próton-elétron – a classificação da energia dos orbitais depende de dois números quânticos: o número quântico principal n e o número quântico secundário ou azimutal l . Com isso, átomos polieletrônicos com menor valor de n mantêm uma classificação linear baseada na maior energia de acordo com o maior número quântico n . Entretanto, enquanto há o aumento de prótons e elétrons nos átomos junto ao maior valor de n , a separação nas energias dos orbitais deixa de seguir um padrão conforme diferentes valores de l surgem. Por isso, muitos átomos possuem o orbital $4s$ com energia menor que os orbitais $3d$. À medida que o número atômico aumenta, a carga nuclear efetiva para todos os elétrons também aumenta, portanto os elétrons tornam-se mais estáveis com essa maior interação entre núcleo e elétron. Por conseguinte, os níveis apresentam redução de energia (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

O físico John Slater desenvolveu algumas regras que orientam como se dá a influência do núcleo sobre os elétrons – a chamada carga nuclear efetiva (Z^*). A carga nuclear efetiva atua como uma medida da atração real do núcleo em relação a um determinado elétron conforme explicam Atkins e Jones (2012). A quantificação dessa medida é dada através da constante de blindagem (S) relacionada ao número de elétrons que interferem a atração elétron-núcleo. Isto posto, a carga nuclear efetiva sob um elétron é sempre menor que a carga nuclear do elemento químico em questão.

Essas regras foram desenvolvidas de maneira semiempírica em que Slater utilizou equações modeladas em funções de onda para ajustar os dados experimentais. Elas são condizentes com as curvas de probabilidade de um elétron em um orbital, afinal os orbitais s e p , por exemplo, possuem maior penetrabilidade em relação ao núcleo que os orbitais d de um mesmo nível.

As regras de Slater para determinação da constante de blindagem que atua sobre determinado elétron seguem, em princípio, duas orientações relevantes:

- A estrutura eletrônica dos átomos é descrita em forma de agrupamentos de acordo com os números quânticos n e l :

(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) ...

- Os elétrons que se dispuseram ao lado direito do elétron de interesse não exercem efeito de blindagem sobre esse.

A partir dessas orientações, trata-se as regras de Slater da seguinte forma:

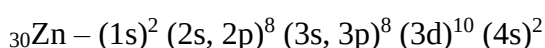
- Para elétrons de valência do tipo *ns* ou *np*:
 - Cada elétron no mesmo grupo contribui com um fator de blindagem equivalente a 0,35;
 - Um elétron em *1s* contribui com um fator de blindagem de 0,30 em relação ao outro elétron de *1s*;
 - Cada um dos elétrons na camada (n-1) blindo o elétron de interesse por um fator de 0,85;
 - Cada um dos elétrons em camada (n-2) ou inferior contribui com um fator de blindagem 1,00 em relação ao elétron de interesse.
- Para elétrons de valência do tipo *nd* ou *nf*:
 - Cada elétron no mesmo grupo contribui com um fator de blindagem equivalente a 0,35;
 - Cada elétron em grupos à esquerda do elétron de interesse contribui com um fator de blindagem igual a 1,00.

Essas regras permitem obter o valor da constante de blindagem (*S*) que deve ser subtraído no número atômico (*Z*) do elemento químico em questão para determinação da carga nuclear efetiva atuante no elétron de interesse (*Z**) conforme a (Equação 21). O elétron de interesse pode ser pertencente ou não a camada de valência, ou seja, as regras de Slater podem ser aplicadas para quaisquer elétrons de um elemento químico, desde que se atente para a distribuição eletrônica a fim de utilizar corretamente as regras.

$$Z^* = Z - S \quad \text{(Equação 21)}$$

Abaixo, um exemplo da aplicação das regras de Slater para um elétron da camada de valência do Zinco (Zn) com número atômico (*Z*) igual a 30.

Distribuição eletrônica para Zn (*Z* = 30) de acordo com os agrupamentos sugeridos para aplicação das regras de Slater:



O cálculo da constante de blindagem (*S*) para um elétron da camada de valência do zinco encontra-se abaixo, (Equação 22), sendo realizado por meio das orientações das regras de Slater. Assim, nesse exemplo, o elétron de interesse escolhido corresponde a um elétron da camada de valência do zinco.

$$S = (1 \times 0,35) + (18 \times 0,85) + (10 \times 1,0) = 25,65 \quad (\text{Equação 22})$$

Logo, a carga nuclear efetiva que atua sobre um elétron de valência do zinco corresponde a 4,35 de acordo com a Equação 23.

$$Z^* = 30 - 25,65 = 4,35 \quad (\text{Equação 23})$$

Na passagem pelas representações dos diagramas de B_2 , C_2 e N_2 para a tríade O_2 , F_2 e Ne_2 a capacidade de blindagem variável com o número de elétrons em orbitais diferentes e as interações entre eles próprios promove um aumento da diferença entre as energias dos orbitais atômicos 2s e 2p. Consequentemente, os orbitais 2s e 2p interagem (hibridizam) menos que em comparação com os orbitais 2s e 2p para as moléculas C_2 e B_2 . Isso justifica-se no contexto do efeito da carga nuclear efetiva que é mais pronunciado sobre os orbitais 2s que possuem maior penetrabilidade em relação ao núcleo, sendo mais vulneráveis a aproximação nuclear à medida que há o aumento da carga nuclear efetiva pelo período.

Não é somente a diferença entre os níveis de energia dos orbitais que atrai a curiosidade dos cientistas na comparação dessas duas tríades de moléculas. Há uma inversão de nível energético entre os orbitais moleculares $\sigma 2p$ e $\pi 2p$. Essa inversão da energia dos orbitais é bastante discutida e estudada por diferentes métodos de cálculo. De acordo com algumas comparações entre métodos de cálculo, a ordem diferente nos níveis de energia é simplesmente uma função do método de cálculo, sendo que a anuência com os resultados experimentais indicados por espectroscopia de fotoelétrons mostra que os orbitais $\sigma 2s$ estão acima (energia mais alta) que os orbitais $\pi 2p$ para o N_2 . A inversão descrita, conhecida como inversão σ - π , relaciona então a carga nuclear efetiva e as interações entre os orbitais. Como já discutido, para o di-nitrogênio e moléculas diatômicas formadas por elementos químicos anteriores a ele, a hibridização entre os orbitais atômicos 2s e 2p é maior devido ao menor espaçamento energético entre esses orbitais comparado as moléculas formadas por elementos do final do período, resultando em um diagrama característico dessas espécies. Assim, as combinações mais efetivas resultam em separações maiores entre orbitais moleculares ligantes e antiligantes. Por conta disso, os orbitais moleculares $\pi 2p_x$ e $\pi 2p_y$ são menos energéticos que o orbital molecular $\sigma 2p_z$ para o di-nitrogênio e moléculas de átomos menores (B_2 e C_2). O orbital molecular $\sigma(2p-2p)$ ocupa a região do eixo internuclear, sendo a mesma região ocupada pelo $\sigma^*(2s-2s)$ com energias próximas. Já os orbitais moleculares $\pi 2p_x$ e $\pi 2p_y$ não ocupam o eixo internuclear, mas ocupam acima e abaixo e na frente e atrás do eixo, contendo planos nodais que contém o eixo de ligação

e assim esses orbitais moleculares π apresentam energia menor, pois não competem na região internuclear. A hibridização será abordada adiante.

O diagrama de orbitais moleculares do di-nitrogênio se apresenta conforme a **Figura 25** e em sequência a **Figura 26** retrata, de forma geral, a organização dos orbitais moleculares para as moléculas diatômicas do segundo período da tabela periódica.

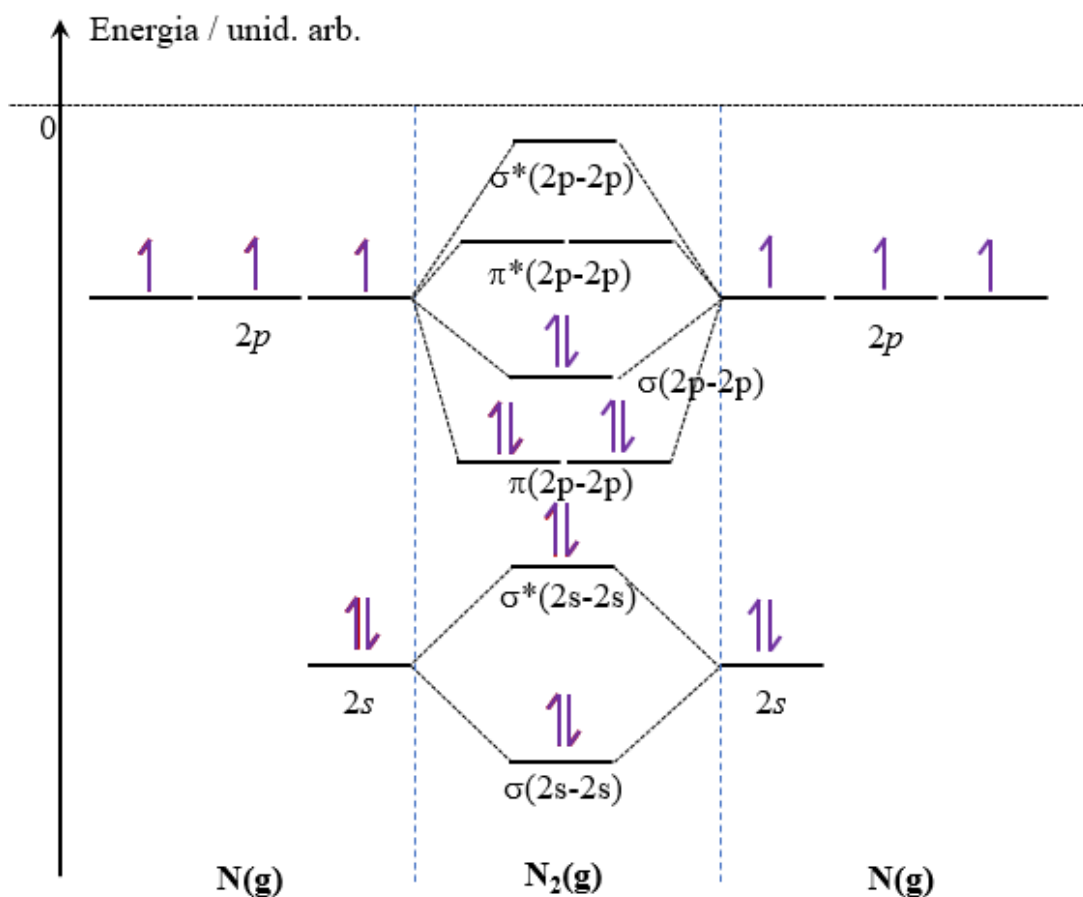


Figura 25 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para N_2 .

Fonte: Obra dos autores.

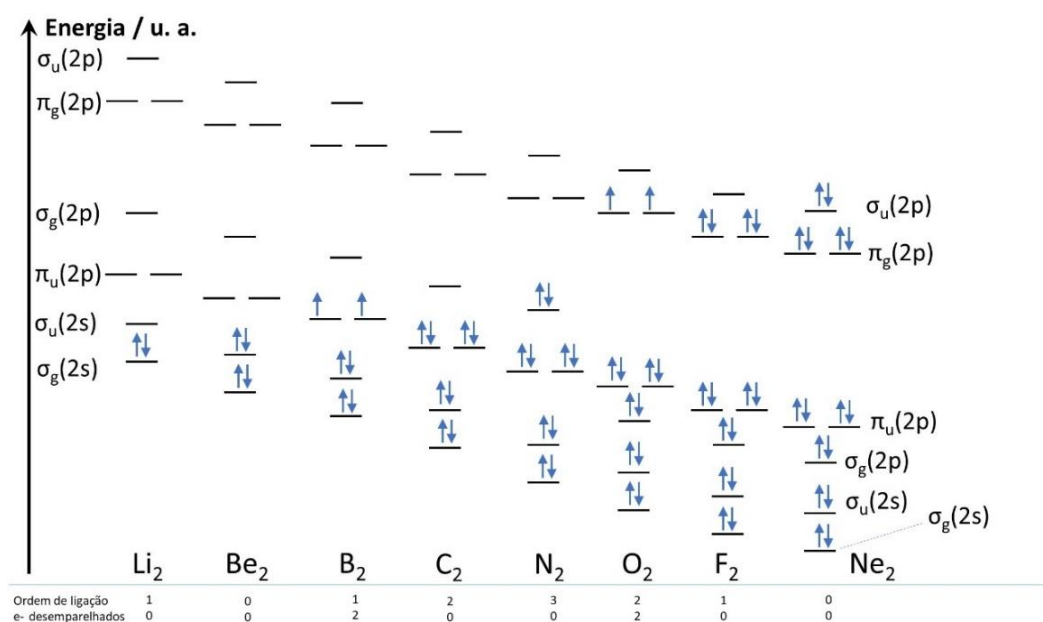


Figura 26 - Níveis de energia dos orbitais atômicos para as moléculas diatômicas do segundo período da tabela periódica.

Fonte: Adaptado de Miessler; Fischer; Tarr (2014, p. 126).

4.4.3 Hibridização de orbitais

As condições de simetria adequada, energias próximas e o equilíbrio das forças eletrostáticas e distância para sobreposição de orbitais, resultam, como já mencionado, na combinação de orbitais atômicos. Focando no aspecto energético, é importante destacar que essa combinação é resultado da sobreposição de orbitais atômicas com energias iguais ou similares.

Segundo Miessler, Fischer e Tarr (2014), essa relação entre orbitais atômicos de energias iguais e energias similares permite duas aproximações retratadas por meio dos diagramas de orbitais moleculares. Quando ocorre interação entre os orbitais atômicos de mesma energia, denominados degenerados, o diagrama de orbitais moleculares é ilustrado conforme a **Figura 27**.

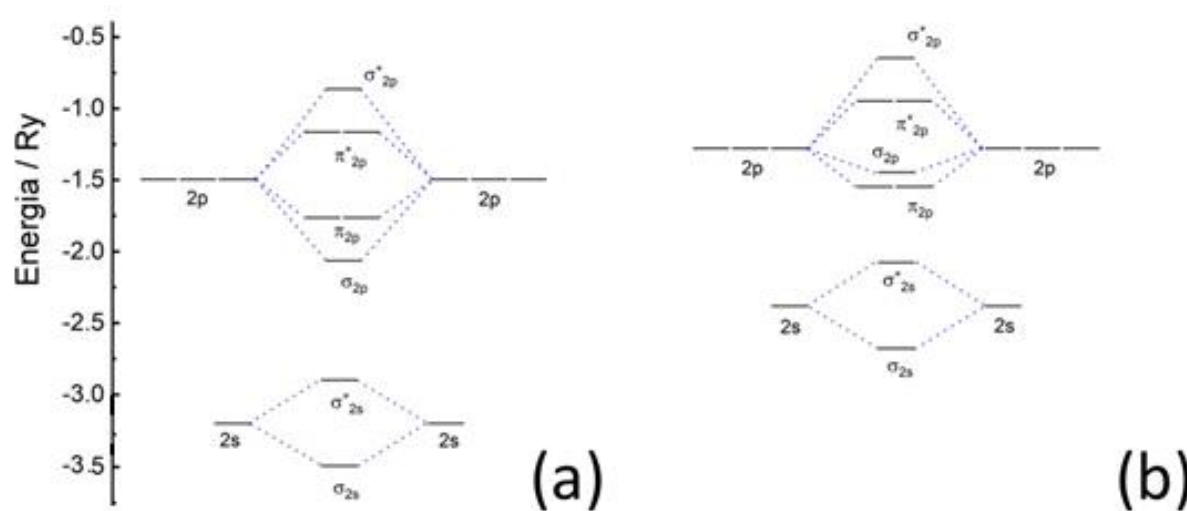


Figura 27 - Interações em um diagrama de orbitais moleculares a) Sem inversão σ - π . b) Com inversão σ - π .

Fonte: Adaptado de Miessler; Fischer; Tarr (2014, p. 125).

Entretanto, quando as interações envolvem orbitais atômicos com energias similares e de mesma simetria, há uma diminuição da energia do orbital σ e aumento da energia do orbital σ^* : a esse processo de interação de orbitais dá-se o nome de hibridização. Por exemplo, na hibridização dos orbitais $\sigma_g(2s)$ e $\sigma_g(2p)$ em moléculas diatômicas homonucleares, em que ambos os orbitais possuem a simetria do tipo σ e uma energia desigual, porém próxima o suficiente para considerar a interação. Nesse caso, a interação entre eles promove um abaixamento do nível de energia de $\sigma_g(2s)$ e o aumento do nível de energia de $\sigma_g(2p)$, conforme ilustrado na comparação entre as imagens *a* e *b* da **Figura 27**, conduzindo ao final a uma maior estabilização dos elétrons.

Outra abordagem desse fenômeno consiste na observação da Equação 16 adaptada a situação conforme a Equação 24. Os dois orbitais atômicos $2s$ e os dois orbitais atômicos $2p_z$ irão gerar quatro orbitais moleculares, segundo o princípio de que o número total de orbitais atômicos corresponde ao número de orbitais moleculares. Os orbitais moleculares resultantes têm a seguinte forma, em que *a* e *b* identificam os dois átomos, com constantes de normalização apropriadas para cada orbital atômico e com os coeficientes da contribuição quantitativa dos orbitais representados por *c*:

$$\psi = C_1\psi(2s_a) \pm C_2\psi(2s_b) \pm C_3\psi(2p_a) \pm C_4\psi(2p_b) \quad (\text{Equação 24})$$

Para a descrição de moléculas diatômicas homonucleares, C_1 é igual a C_2 e C_3 é igual a C_4 em cada um dos quatro orbitais moleculares (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). A energia mais baixa de um orbital molecular terá maiores valores de C_1 e C_2 . Já a energia mais alta para um orbital molecular terá maiores valores de C_3 e C_4 enquanto os orbitais moleculares intermediários terão valores de energia intermediários entre os quatro coeficientes. Com a hibridização, as energias dos orbitais moleculares são diferentes daqueles gerados sem a hibridização. Além disso, as formas desses orbitais moleculares resultantes de hibridização são modificadas devido as contribuições recebidas dos orbitais atômicos s e p ou da hibridização $s-p$. A energia é deslocada segundo a contribuição de cada orbital, o que faz com que os orbitais superiores possuam maior contribuição do $2p_z$ enquanto os outros dois recebem maior contribuição de $2s$ (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

A hibridização $s-p$ contribui para a disposição energética dos orbitais $\sigma 2s$ e $\sigma 2p$ ser diferente entre Li_2 ao N_2 e O_2 a Ne_2 . Como as energias dos orbitais vão sendo reduzidas com a maior estabilidade dos elétrons provocada pelo efeito da carga nuclear efetiva, as interações entre os orbitais s e p são modificadas ao longo do período resultando na inversão $\sigma-\pi$. Assim, o aumento da carga nuclear efetiva ao longo do período promove um afastamento dos orbitais $2s$ e $2p$ que passam a interagir (ou hibridizar) com menor eficiência em moléculas como O_2 , F_2 e Ne_2 . Por conta disso, nessas moléculas (di-oxigênio, di-flúor, di-neônio), o orbital de simetria σ ($\sigma 2p_g$) formado a partir de dois orbitais atômicos $2p_z$ possui menor energia que os orbitais de simetria π ($\pi 2p_u$) gerados dos orbitais $2p_x$ e $2p_y$ (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

A hibridização interfere no comportamento magnético de moléculas e na natureza ligante/antiligante de orbitais. Os orbitais com energias intermediárias podem adquirir um caráter parcialmente ligante ou antiligante, contribuindo para a ligação química com menor participação (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

4.4.4 Orbitais HOMO e LUMO

Os orbitais moleculares HOMO (Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia) e LUMO (Orbital Molecular Não Ocupado de Menor Energia) são chamados de orbitais de fronteira em moléculas. Os orbitais moleculares HOMO são aqueles de maior energia ocupados por elétrons enquanto os orbitais moleculares LUMO não apresentam elétrons (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Cada um desses orbitais possui uma energia segundo a entidade química

a que pertencem. Essa energia orbital determina o gasto energético de remoção de elétrons ou a liberação de energia do sistema com a adição eletrônica. Isso ocorre devido a associação do orbital HOMO com a energia de ionização (E_i) e do LUMO com a afinidade eletrônica (A_e) (Miessler; Fischer; Tarr, 2014).

A primeira energia de ionização se relaciona a energia do orbital HOMO (Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia), pois o elétron a ser removido encontra-se em orbital de maior energia e mais distante do núcleo. Por conseguinte, se espera que a primeira energia de ionização não seja elevada, mas há um aumento considerável à medida que elétrons mais internos forem retirados. A posição energética do orbital HOMO indica quais elementos químicos são mais susceptíveis a perda eletrônica, ou seja, aqueles que possuem uma baixa primeira energia de ionização formando cátion com facilidade. Caso a intenção seja a adição de um elétron nas condições definidoras da afinidade eletrônica, então o sistema molecular libera a quantidade equivalente de energia ao orbital LUMO (Orbital Molecular Não Ocupado de Menor Energia) – orbital molecular disponível para recebimento de elétrons. Logo, há formação de um ânion com a adição de elétron em orbital LUMO. Uma ilustração representativa dessa relação consta na **Figura 28**.

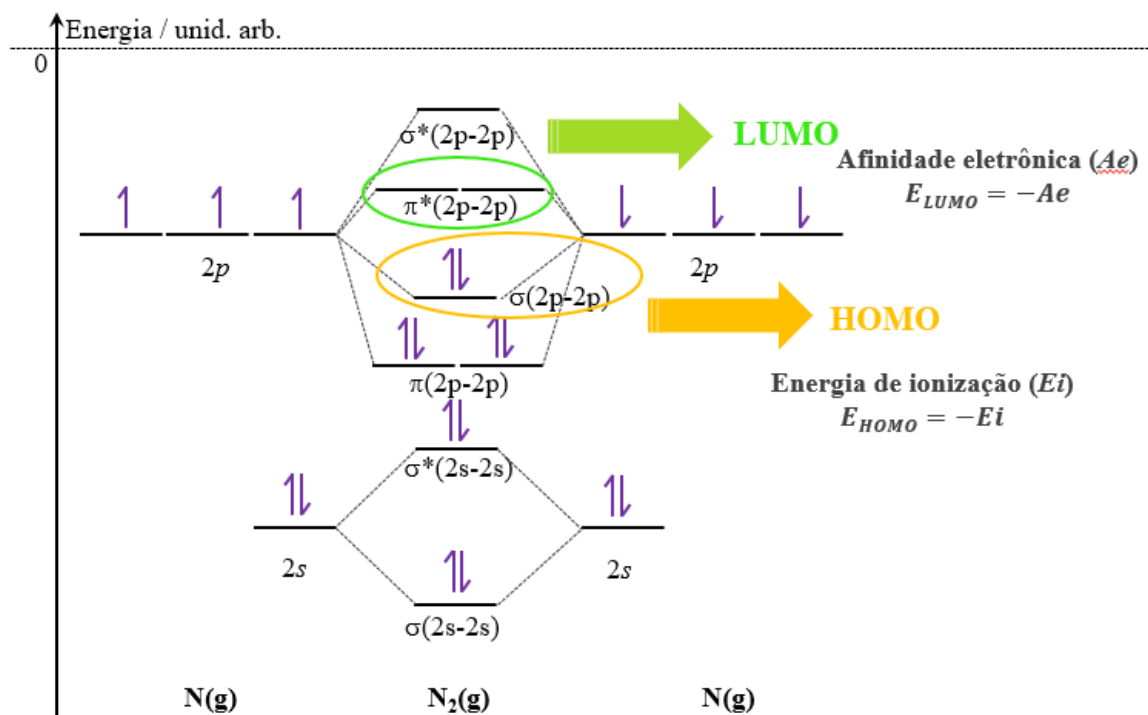


Figura 28 - Ilustração representativa dos orbitais moleculares HOMO e LUMO.

Fonte: Obra dos autores.

A diferença energética entre os orbitais HOMO e LUMO é utilizada na descrição de ácidos e bases mediante as classificações de Lewis e Pearson e na distinção da condutividade elétrica de materiais condutores, semicondutores e isolantes (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). A teoria ácido-base de Lewis que convencionou o ácido como toda espécie química aceptora de par de elétrons e a base como a espécie doadora de par de elétrons trata o HOMO como o orbital molecular doador de pares de elétron da base, enquanto o LUMO é o receptor do ácido. Em geral, a combinação de orbitais HOMO e LUMO em reações ácido-base geram novos orbitais HOMO e LUMO para o produto caso as condições de simetria, energia e sobreposição sejam atendidas. Se essas condições não forem cumpridas, então não há produto ácido-base. A estabilidade do produto depende da energia desses orbitais. A junção da teoria ácido-base de Lewis com os orbitais HOMO e LUMO infere que todas as moléculas podem atuar como ácido ou base dependendo das condições reacionais (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Para Pearson a classificação de ácidos e bases ganha mais um tópico: a polarizabilidade. Nessa teoria, os ácidos e bases são categorizados como duros e moles (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Os ácidos e bases duros são relativamente pequenos, compactos e não polarizáveis. Já os ácidos e bases moles são maiores e polarizáveis, havendo exceções nessas classificações. Pearson definiu quantitativamente a dureza absoluta (η) de ácidos e bases como mostra a (Equação 25) através das propriedades periódicas energia de ionização (E_i) e afinidade eletrônica (A_e) que são vinculadas aos orbitais de fronteira. A variação de energia dos orbitais HOMO e LUMO colabora na descrição das espécies duras e moles e na formação dos produtos gerados por elas. Espécies duras costumam apresentar maior diferença energética entre os orbitais de fronteira em comparação com as moles.

$$\eta = \frac{E_i - A_e}{2} \quad (\text{Equação 25})$$

Além das teorias ácido-base, o estudo dos orbitais HOMO e LUMO aparece vinculado a Química Orgânica. Fukui, Yonezawa e Shingu (1952) investigaram a densidade eletrônica nesses orbitais revelando a importância do HOMO na reatividade de compostos orgânicos, permitindo a previsão de reações de substituição.

4.4.5 Diagramas de orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares do segundo período da tabela periódica – O₂, F₂ e Ne₂

Conforme explicado anteriormente, os diagramas de orbitais moleculares passam por uma inversão nos orbitais moleculares do tipo σ e π . Abaixo a **Figura 29** traz a representação do diagrama de orbitais moleculares para o O₂ em que F₂ e Ne₂ seguem o mesmo padrão.

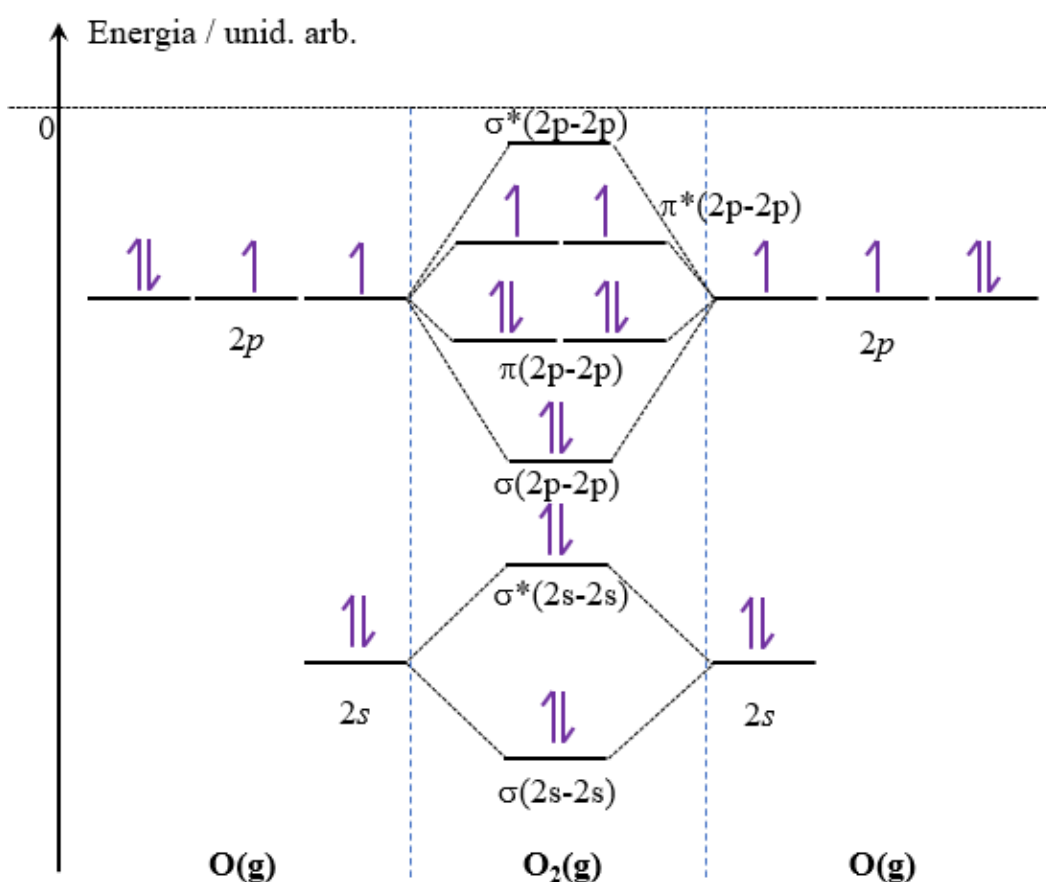


Figura 29 - Representação do diagrama de orbitais moleculares para O₂.

Fonte: Obra dos autores.

Frequentemente os diagramas do di-oxigênio e di-nitrogênio são comparados para tratar do magnetismo de moléculas. A observação da representação por traços da estrutura de Lewis para o O₂ não permite explicar por que essa espécie é paramagnética. Uma espécie é paramagnética quando ao ser exposta a um campo magnético externo acaba por apresentar atração. Isso ocorre porque cada átomo se comporta como um pequeno ímã já que os elétrons em movimento produzem campo magnético. Assim, pensando em um bloco de um certo material paramagnético exposto a um campo magnético, tem-se que os domínios magnéticos

gerados pelas cargas elétricas irão se orientar de forma que a atração seja predominante. Os compostos que apresentam elétrons desemparelhados são mais susceptíveis a esse comportamento paramagnético, o que é o caso do O_2 . Esses elétrons desemparelhados se encontram nos orbitais π^*2p_x e π^*2p_y . Ao observar esses orbitais moleculares, nota-se que além de estarem ocupados com elétrons são os de maior energia. Aos orbitais moleculares ocupados com maior energia dá-se o nome HOMO (Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia). E quanto ao N_2 ? Voltando a (**Figura 25**), percebe-se que o orbital molecular HOMO dessa espécie - $\sigma 2p_z$ - está ocupado de modo que os elétrons estão emparelhados. Se os elétrons estão emparelhados, uma resposta atrativa frente a um campo magnético externo não acontece. A entidade que apresenta essas características é conhecida como uma espécie diamagnética. Uma espécie diamagnética é ligeiramente repelida por um campo magnético externo. Outra molécula interessante de lembrar é o B_2 . Com elétrons desemparelhados no orbital HOMO (Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia), o B_2 é paramagnético, algo comprovado experimentalmente, mas que também não é previsto pelo modelo de Lewis. Conforme explicam os autores Miessler, Fischer e Tarr (2014), o paramagnetismo do di-boro ocorre por conta da hibridização entre os orbitais $s-p$. Nessa interação, o orbital $\sigma_g(2s)$ hibridiza com o orbital $\sigma_g(2p)$ resultando em uma diminuição da energia do orbital molecular $\sigma_g(2s)$ e aumento da energia do orbital molecular $\sigma_g(2p)$. Consequentemente, o orbital molecular $\sigma_g(2p)$ passa a ser mais energético que os orbitais moleculares degenerados $\pi_u(2p)$. Assim, o preenchimento dos orbitais moleculares $\pi_u(2p)$ infere sobre o paramagnetismo da molécula ao passo que nesses orbitais os elétrons encontram-se desemparelhados atendendo ao Princípio de Hund. Se não houvesse a hibridização $s-p$, o orbital molecular HOMO de B_2 seria o $\sigma_g(2p)$ e, por conseguinte, os elétrons estariam emparelhados e a molécula seria tratada como diamagnética.

O O_2 apresenta uma ordem de ligação equivalente a 2 o que é coerente com medidas experimentais e o modelo de Lewis.

Seguinte ao O_2 , F_2 e Ne_2 completam o segundo período da tabela periódica. O di-flúor possui uma ordem de ligação igual a 1 o que reflete a ligação simples dessa espécie. Além disso, é uma espécie diamagnética, pois o orbital molecular HOMO possui os elétrons emparelhados como indicada na representação da **Figura 30**.

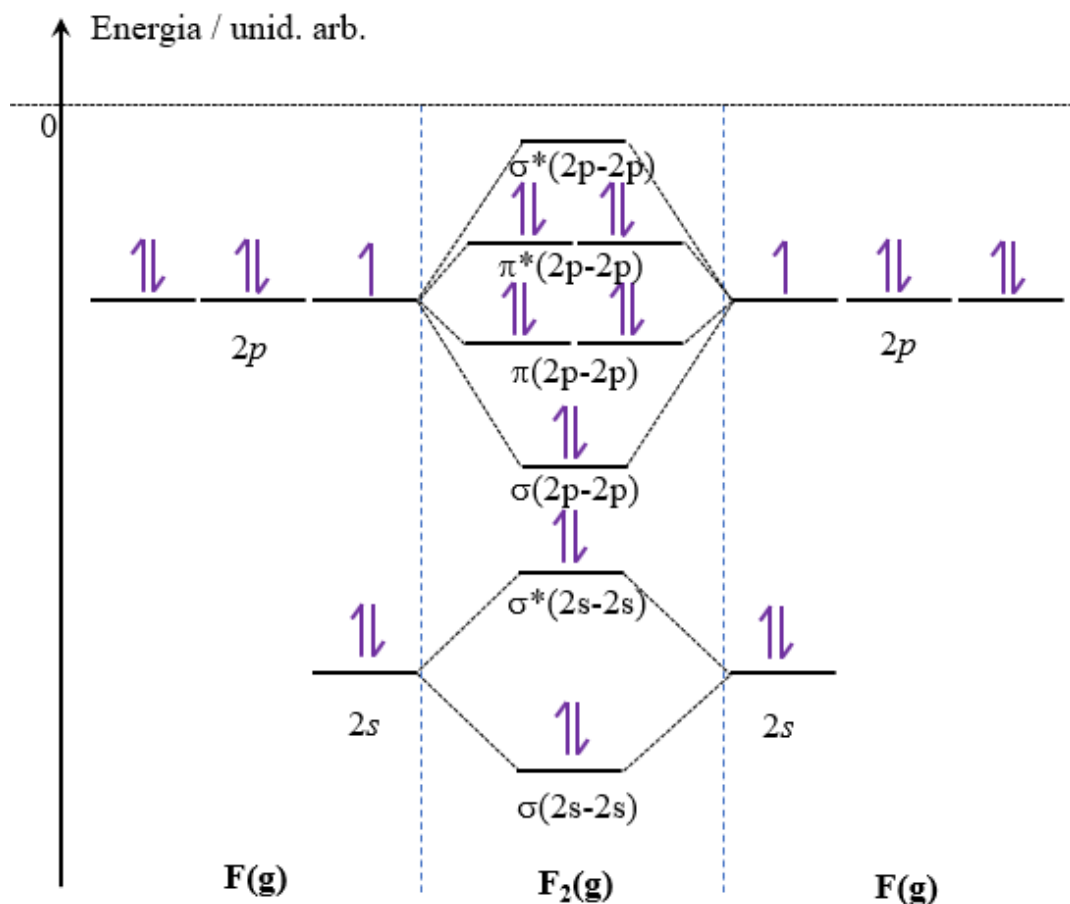


Figura 30 – Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para F_2 .

Fonte: Obra dos autores.

Nesse momento, aproveitando o diagrama de F_2 para indicação do orbital HOMO, observa-se também um outro orbital molecular importante: o LUMO (Orbital Molecular Não Ocupado de Menor Energia). O orbital molecular LUMO é aquele sem a presença de elétrons e com a menor energia possível. No exemplo dado através da molécula de flúor, trata-se dos orbitais moleculares π^*2p_x e π^*2p_y . Os orbitais moleculares HOMO e LUMO são relevantes no estudo do comportamento ácido e básico de espécies químicas e de atuação ligante das entidades que participam de compostos de coordenação, sendo mais amplamente estudados, geralmente, em anos posteriores nos cursos de graduação em Química.

O Ne_2 apresenta um diagrama de orbitais moleculares segundo a **Figura 31**, sendo semelhante ao di-hélio quando se trata da ordem de ligação nula devido ao preenchimento igualitário de elétrons em orbitais moleculares ligantes e antiligantes.

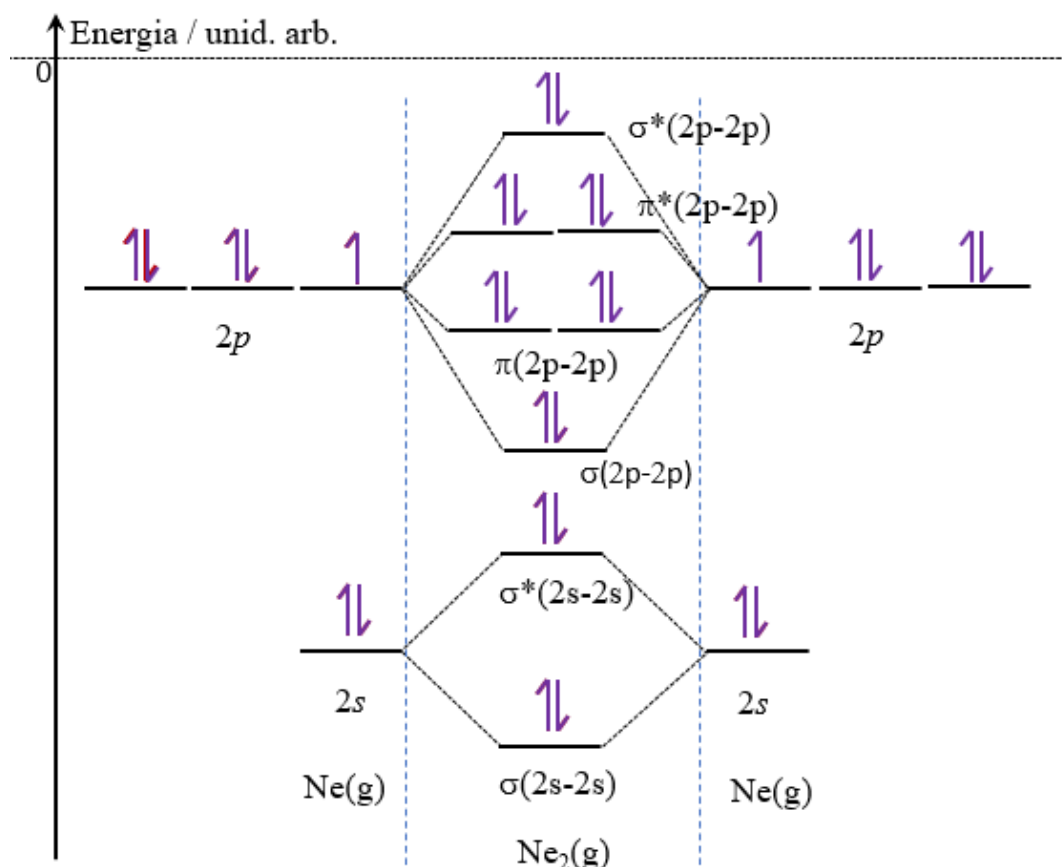


Figura 31 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para Ne_2 .

Fonte: Obra dos autores.

4.4.6 Espectroscopia de fotoelétrons

Como validar a Teoria do Orbital Molecular (TOM) experimentalmente?

Através da técnica denominada Espectroscopia de Fotoelétrons. Essa técnica baseia-se no efeito fotoelétrico que trata da interação entre a matéria e os fótons. O efeito fotoelétrico foi descrito por Albert Einstein em 1905 e consiste na concepção de que a energia é transportada de maneira quantizada e que ao ser incidida sob um material sólido pode ejetar elétron da superfície. Para o elétron ser ejetado da superfície é necessário que a energia incidente tenha uma frequência mínima capaz de arrancar o elétron do material, independentemente do tempo de exposição ou intensidade da luz.

Os equipamentos usados na espectroscopia fotoeletrônica são construídos de maneira a possuírem, geralmente, duas placas com diferença de potencial separadas por uma distância determinada. Conforme explicam os autores Dias e Anjos (2021), há a excitação de uma placa negativamente carregada por uma fonte de radiação eletromagnética. Então, os fotoelétrons

gerados atravessam o vácuo em direção a placa positivamente carregada, produzindo uma corrente fotoelétrica.

A radiação eletromagnética utilizada costuma ser raios ultravioletas (UV) ou os raios X. Caso a fonte incidente seja composta por raios UV, serão retirados os elétrons superficiais do material já que essa radiação é menos energética em comparação com os raios X, sendo responsáveis pela remoção de elétrons mais internos. Essa remoção de elétrons com o uso de uma energia de frequência característica constitui a ideia central da energia para ionização. Assim, a espectroscopia de fotoelétrons resulta em um entendimento da relação de energia necessária para remoção de um elétron de orbital interno ou da camada de valência. Quão mais próximo ao núcleo estiver o elétron, maior será a energia gasta para remoção. Em contrapartida, ao pertencer a camada de valência que sente menor atração nuclear, a energia despendida é inferior.

Para determinar as energias dos orbitais moleculares utiliza-se uma radiação de energia conhecida incidindo sobre moléculas no estado gasoso.

Tomando como exemplo a representação exibida na **Figura 32**, tem-se que os elétrons ejetados, por meio da fonte de radiação, são retirados de moléculas no estado gasoso com uma energia cinética (E_{cin}) medida por um analisador e, por fim, chegam ao detector. A partir da energia da radiação incidente $h\nu$ e da energia cinética dos fotoelétrons, a energia para ionização da molécula (E_{im}) é determinada através da (Equação 26).

$$E_{im} = h\nu - E_{cin} \quad \text{(Equação 26)}$$

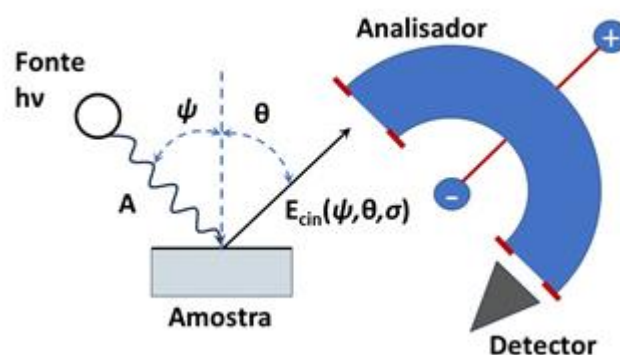


Figura 32 - Ilustração geral do experimento de espectroscopia fotoeletrônica.

Fonte: Adaptado de Dias e Anjos (2021).

4.4.7 Diagramas de orbitais moleculares para moléculas diatômicas heteronucleares do segundo período da tabela periódica

As moléculas diatômicas heteronucleares possuem orbitais atômicos com energias distintas e, em vista disso, os orbitais moleculares são formados por contribuições desiguais de cada orbital atômico (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). As diferentes cargas nucleares dos átomos promovem interações entre os orbitais atômicos que resultam em um deslocamento de energia dos orbitais moleculares. A maior contribuição dada a um orbital molecular provém do orbital atômico com energia mais próxima a ele. Ademais, a equação de onda apresenta um coeficiente maior para as maiores contribuições. A distinção de energia entre os átomos é reconhecida por meio da diferença de posicionamento dos orbitais atômicos nos diagramas em que o átomo com maior eletronegatividade ocupa as posições mais inferiores em nível de energia (Miessler; Fischer; Tarr, 2014). Isso pode ser explicado pela maior capacidade de atração de um átomo para com os elétrons ao redor, resultando na aproximação dos elétrons do átomo em questão e nos elétrons de uma ligação. Portanto, o átomo mais eletronegativo possui orbitais atômicos com menor energia potencial que os átomos pouco eletronegativos.

O preenchimento dos orbitais moleculares segue os mesmos princípios apresentados para os diagramas de moléculas diatômicas homonucleares com a diferença de posição energética dos orbitais, conforme o diagrama genérico da **Figura 33** para uma molécula AB.

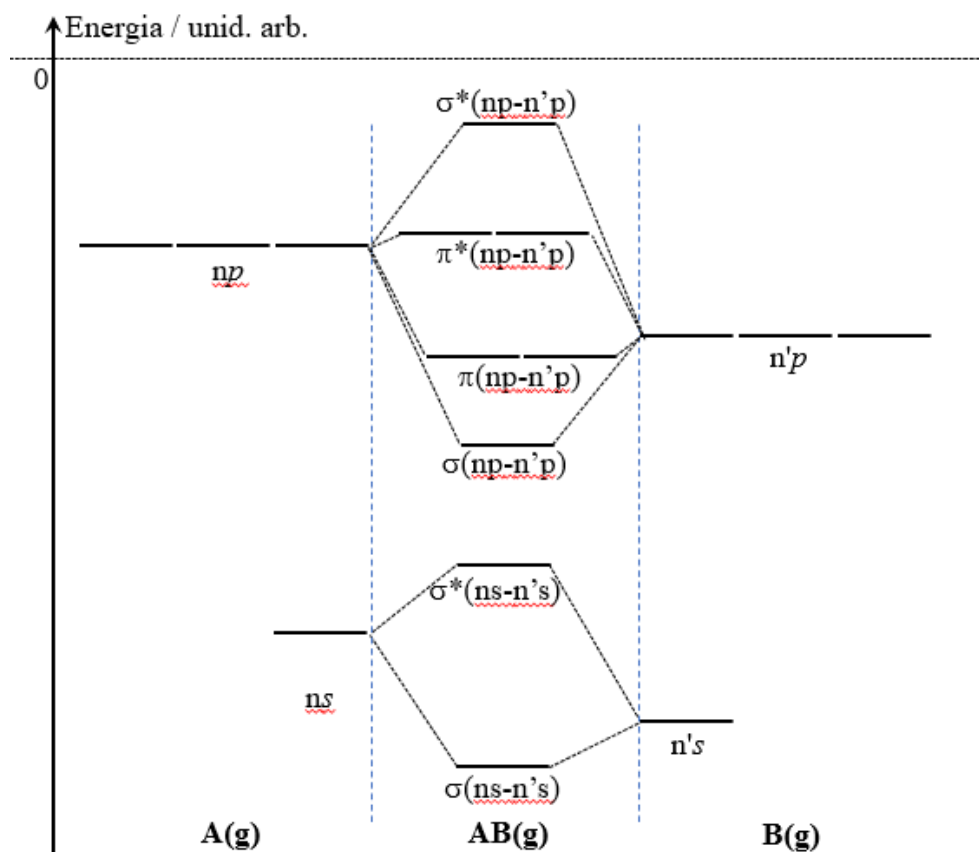


Figura 33 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para uma molécula genérica AB - espécie diatômica heteronuclear.

Fonte: Obra dos autores.

Abaixo, seguem alguns diagramas representativos de moléculas diatômicas heteronucleares formadas por átomos do segundo período da tabela periódica.

HF

O fluoreto de hidrogênio (HF) conta com 10 elétrons distribuídos pelos orbitais moleculares. Na ilustração da **Figura 34** o orbital atômico 1s do flúor é omitido devido à similaridade de representação ao orbital 2s. Percebe-se que como a molécula é heteronuclear, a discordância em energia potencial dos orbitais atômicos é transmitida por meio da disparidade de posição desses orbitais. Como o flúor é um elemento químico mais eletronegativo em comparação com o hidrogênio, seu posicionamento se dá em energias potenciais mais baixas.

A ligação química é formada, principalmente, pelas contribuições dos orbitais atômicos 1s do hidrogênio e 2p_z do flúor, produzindo uma ligação do tipo σ(1s-2p_z). Os orbitais 1s, 2s, 2p_x e 2p_y do flúor refletem orbitais moleculares não ligantes. Os orbitais atômicos do flúor 1s e

2s são distantes em energia do orbital 1s do hidrogênio, enquanto $2p_x$ e $2p_y$ não são propícios a realizar sobreposição efetiva junto ao hidrogênio devido a incompatibilidade de simetria. Assim, a representação dos orbitais moleculares não ligantes é dada no diagrama como σ_{NL} ou π_{NL} .

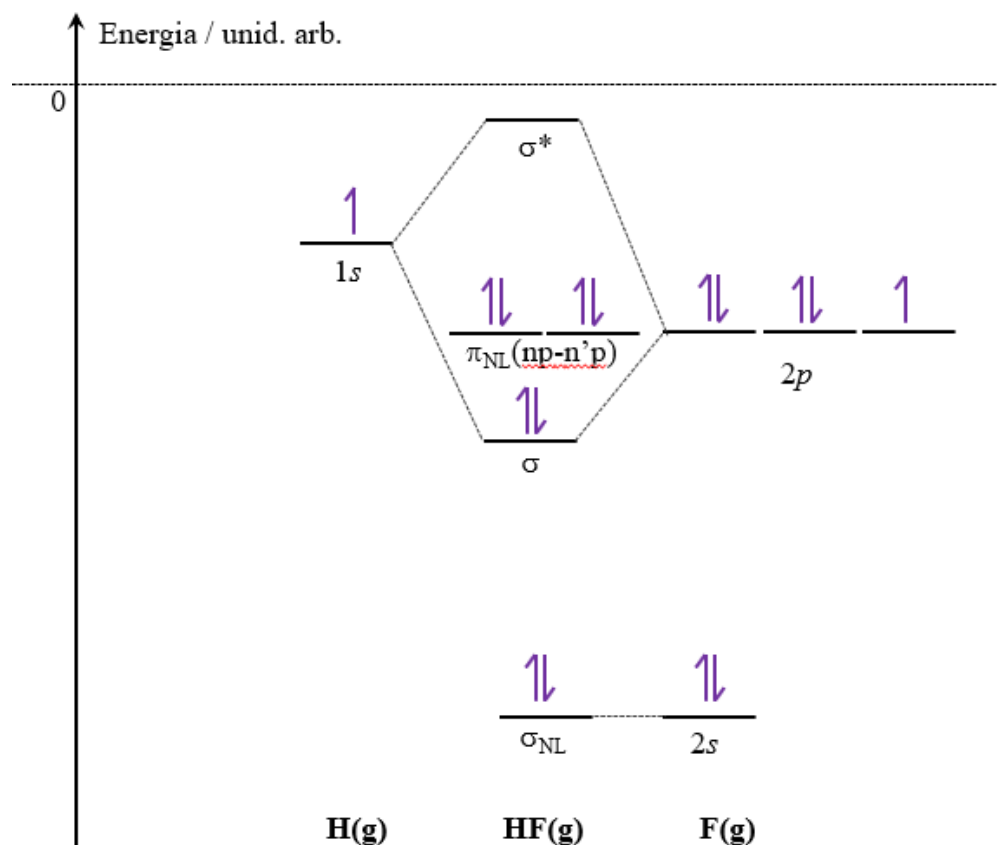


Figura 34 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para HF.

Fonte: Obra dos autores.

NO

O óxido nítrico (NO) é um caso especial tratado pela Teoria do Orbital Molecular (TOM) em virtude da dificuldade da Teoria da Ligação de Valência (TLV) na explicação da existência de uma espécie com número ímpar de elétrons – (**Figura 35**).



Figura 35 - Representação do óxido nítrico.

Fonte: Obra dos autores.

Ao se fundamentar na ligação química oriunda de pares de elétrons, a TLV não consegue tratar com facilidade casos como o do NO e NO₂ (dióxido de nitrogênio). Por sua vez, a TOM não enfrenta esse problema ao dissociar a imagem da ligação química com a paridade. A partir disso, a TOM distribui os elétrons pelos orbitais moleculares e o NO é tratado com naturalidade por esse modelo. Desse modo, o diagrama de orbitais moleculares do NO se apresenta como um diagrama de moléculas diatômicas heteronucleares em que o átomo de oxigênio possui menor energia que o nitrogênio como mostrado na **Figura 36**.

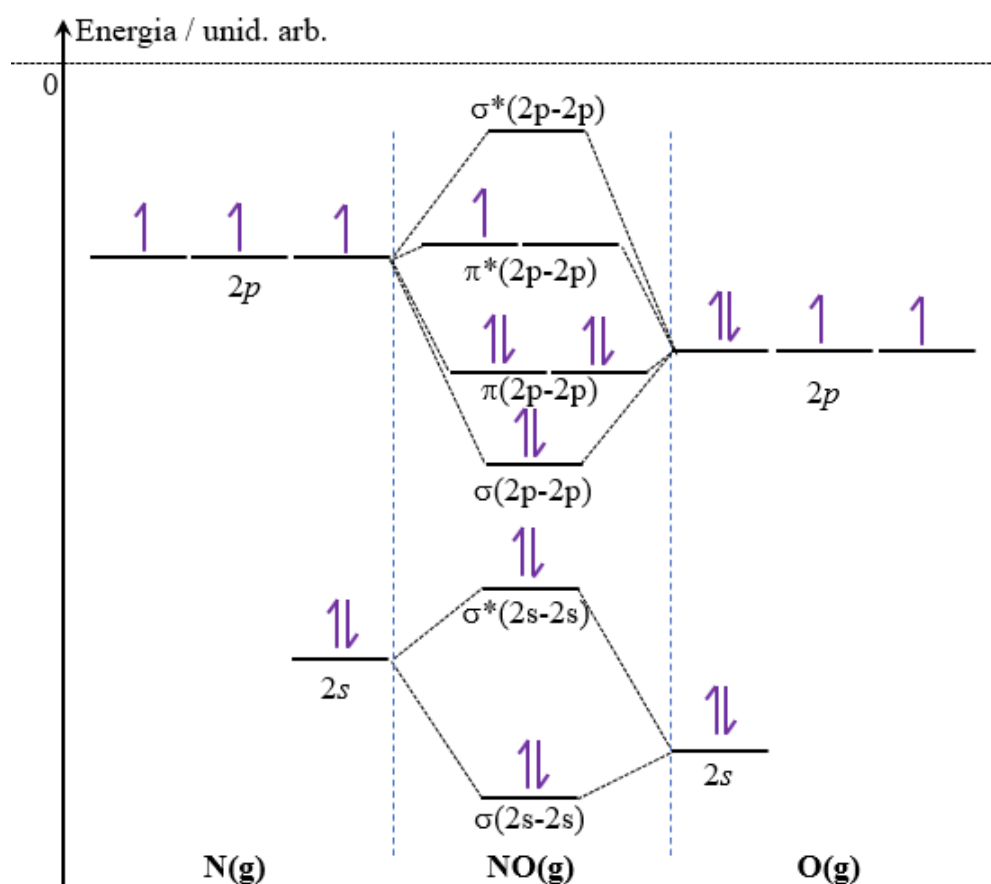


Figura 36 – Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para NO.

Fonte: Obra dos autores.

Ao observar a **Figura 36**, se nota que há um elétron desemparelhado no orbital HOMO indicando que a espécie molecular é paramagnética. Além disso, caso se faça o cálculo da ordem de ligação através da (Equação 18), o resultado é de 2,5. O resultado fracionário condiz com o elétron desemparelhado, confirmando a existência da espécie já que a ordem de ligação é superior a zero. Através do diagrama, verifica-se que o elétron desemparelhado se distribui pela molécula, superando o ideal fixo de ligação como par de elétrons. O elétron desemparelhado

confere ao NO a reatividade de um radical livre. Em decorrência disso, o NO atua no sistema imunológico como substância tóxica liberada pelos macrófagos contra os antígenos. O NO foi amplamente estudado pelos cientistas norte-americanos Robert Furchgott, Louis Ignarro e Ferid Murad, vencedores do Prêmio Nobel de Medicina em 1998 por conta das descobertas de sua atuação no organismo humano como agente defensor, vasodilatador e neurotransmissor (Barreto; Correia, 2005).

CO

O monóxido de carbono (CO) consiste em uma molécula com um total de 14 elétrons distribuídos pelos orbitais moleculares conforme a **Figura 37** em que são omitidos os orbitais moleculares $\sigma(1s-1s)$ e $\sigma^*(1s-1s)$. No CO, os orbitais moleculares $\pi 2p_x$ e $\pi 2p_y$ têm menor energia que o orbital molecular $\sigma 2p_z$. A forma do orbital molecular $\sigma 2p_z$ é vinculada aos orbitais $2s$ e $2p_z$ do carbono que interagem com o orbital $2p_z$ do oxigênio. Essa interação é possível devido à proximidade de energia entre esses orbitais; o orbital $2p_z$ do oxigênio possui energia intermediária entre os orbitais $2s$ e $2p_z$ do carbono. Como o orbital $\sigma 2p_z$ recebe as contribuições de dois orbitais do carbono e de um orbital do oxigênio, há um maior lóbulo na extremidade do carbono. Já nos orbitais moleculares $\pi 2p_x$ e $\pi 2p_y$, os lóbulos maiores recebem maior contribuição do oxigênio devido a melhor equivalência de energia entre esses orbitais e os orbitais atômicos $2p_x$ e $2p_y$ do oxigênio. Entretanto, quando se trata dos orbitais moleculares antiligantes – $\pi^* 2p_x$ e $\pi^* 2p_y$ – há maior contribuição dos orbitais atômicos $2p_x$ e $2p_y$ do carbono.

Por efeito da organização dos orbitais moleculares, o monóxido de carbono surge como um ligante denominado carbonila junto aos metais de transição. O esperado, por conta da eletronegatividade, era de que o oxigênio se ligasse aos metais de transição (M) que são eletropositivos. Consequentemente, surgiria a ligação M-O-C. Todavia, é comum aparecer a ligação de M-C-O. Isso acontece porque o orbital molecular $\sigma 2p_z$ apresenta maior densidade eletrônica no carbono. Como esse orbital é o HOMO da molécula, então há acessibilidade dos elétrons ali localizados surgindo uma doação de densidade eletrônica do CO para um orbital desocupado do metal. Quanto ao orbital LUMO do CO que corresponde aos orbitais moleculares antiligantes $\pi 2p_x$ e $\pi 2p_y$, há o aceite de elétrons advindos do metal em reações organometálicas.

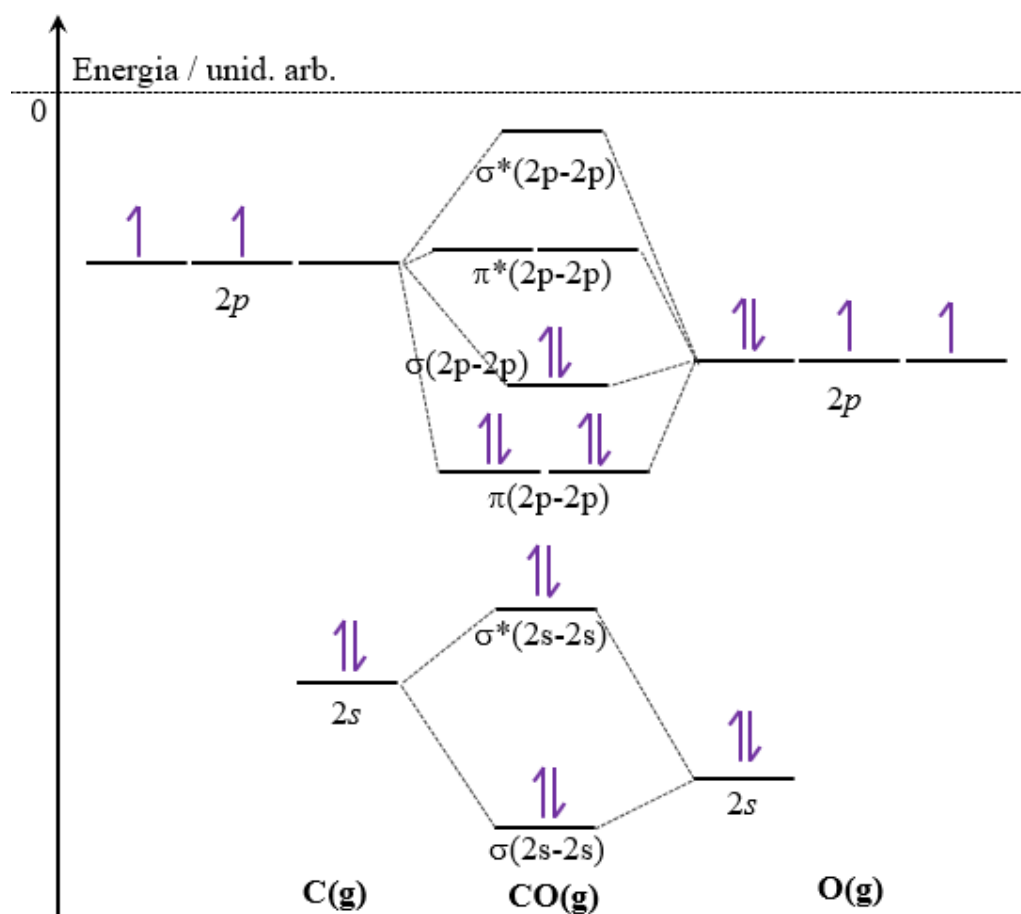


Figura 37 - Representação gráfica do diagrama de orbitais moleculares para CO.

Fonte: Obra dos autores.

4.5 Teoria do Orbital Molecular e Eletronegatividade

Conforme apresentado na seção “Justificativa”, este trabalho tem como um dos objetivos observar a relação entre eletronegatividade e TOM para compreender a disposição energética dos orbitais moleculares e apontar conclusões no que tange a inversão $\sigma - \pi$.

A disposição dos orbitais atômicos nos diagramas de orbitais moleculares para espécies diatômicas heteronucleares é modificada de acordo com a eletronegatividade. Se um átomo A possui maior eletronegatividade que um átomo B, então o primeiro apresenta menor energia potencial e, conseqüentemente, os seus orbitais moleculares são localizados em energias potenciais menores que os de B no diagrama. Tratar da relação eletronegatividade e TOM não é simples. De início é necessário compreender o que é eletronegatividade para que a partir disso se possa selecionar qual escala dessa propriedade corresponde melhor ao objetivo deste trabalho.

Ante o exposto, os tópicos seguintes tratam de quatro escalas de eletronegatividade. São as escalas de Linus Pauling, Robert Mulliken, Albert Allred e Eugene Rochow e, por fim, Leland Allen.

4.5.1 A escala de eletronegatividade para Pauling (1932)

A definição de eletronegatividade é ponderada por Tantardini e Oganov (2021) como a tendência de um átomo em atrair a densidade de elétrons e, por conseguinte, polarizar a ligação química. Esse conceito é datado até 1819 quando Jöns Jacob Berzelius dividiu os elementos em eletronegativos e eletropositivos (Tantardini; Oganov, 2021). De acordo com os autores, foi em virtude da teoria de ligação química desenvolvida por Gilbert Newton Lewis em 1916, que Linus Pauling obteve uma base para a elaboração da primeira escala de eletronegatividade em 1932.

Pauling (1984) conta no trabalho “*G. N. Lewis and the Chemical Bond*” sobre seus primeiros contatos com Lewis e seu princípio de ligação química. Segundo Pauling (1984), o artigo “*The Atom and the Molecule*” publicado em 1916 no *Journal of the American Chemical Society* foi o primeiro contato com as ideias de Lewis que trouxe como grande contribuição a interpretação de que uma ligação química corresponde um par de elétrons mantidos em conjunto entre dois átomos.

Naquele período, Pauling utilizava a biblioteca do *Oregon Agricultural College* como um lugar de estudo e, de certa maneira, como um escritório particular em meio ao seu trabalho em tempo integral como instrutor de análise quantitativa na mesma instituição. Ali, Pauling teve contato com as obras de Lewis e Irving Langmuir, importante personagem na divulgação científica dessa temática.

Em 1920, Pauling foi convidado para ministrar aulas no Instituto de Tecnologia da Califórnia e em uma de suas viagens, aproveitou o tempo de parada do trem para conhecer o *Gilman Hall* da Universidade da Califórnia, local de trabalho de Lewis. Sem sucesso na primeira tentativa de contato, Pauling conheceu Lewis somente em 1924 ao visitar a cidade de Berkeley, na Califórnia, para conhecer Lloyd Alexandre Jeffress, cientista responsável por lhe incentivar, quando jovem, o interesse pela Ciência Química. Com Lewis, Pauling pôde conversar sobre a determinação de estruturas cristalinas com o uso da difração de raios X e obter seu consentimento para atuar em Berkeley através de uma bolsa do Conselho de Pesquisa. Entretanto, pouco tempo após a visita, Pauling desistiria da bolsa de pesquisa e se dedicaria a

outros projetos no continente europeu. Desse modo, um novo encontro entre Lewis e Pauling ocorreria somente quatro anos depois.

Em 1929, Pauling começou a atuar como palestrante em Berkeley, passando de 1 a 2 meses no local e intensificando os encontros com Lewis. As trocas de conhecimento entre ambos se fortaleciam, visto que, assim como Lewis, Pauling também se interessava pela ligação química e a estrutura molecular. Além de definir ligação química, Lewis estudou o compartilhamento do par eletrônico entre dois núcleos. Lewis entendeu que essa partilha poderia ocorrer de forma desigual. Disso, surgiu a discussão sobre o caráter iônico parcial das ligações químicas, em especial nas espécies diatômicas formadas por átomos diferentes. Nesse caso, o par de elétrons poderia se encontrar deslocado para mais perto de um ou outro átomo. O caráter iônico possibilita que a ligação se torne mais estável que àquela caracterizada por uma ligação covalente pura entre átomos diferentes (Pauling, 1984). Já em moléculas diatômicas com átomos iguais, o compartilhamento não apresentaria distinção e o par eletrônico estaria distribuído entre eles. A natureza química intermediária da ligação foi importante para a proposta da primeira escala de eletronegatividade em 1932 por Pauling.

A escala de eletronegatividade proposta por Pauling foi baseada a partir de dados experimentais de energias de ligação. Inicialmente, Pauling trabalhou com as diferenças entre as energias de ligação de moléculas diatômicas homonucleares (A-A, B-B) e heteronucleares (A-B). O químico interpretou que a energia de ligação (D) de uma molécula diatômica heteronuclear (AB) poderia ser dada como à média das energias de ligação das moléculas homonucleares de origem (A-A e B-B) conforme mostra a (Equação 27), em que D(A-A) e D(B-B) correspondem, respectivamente, a energia de ligação das moléculas A₂ e B₂.

$$D(A - B) = \frac{D(A-A) + D(B-B)}{2} \quad (\text{Equação 27})$$

Entretanto, os resultados teóricos proporcionados pela (Equação 27) eram menores que os valores experimentais de espécies diatômicas heteronucleares. Esse contraste motivou uma mudança na (Equação 27) e uma explicação para o motivo dessa questão. Segundo Pauling (1960), esse contraste ocorre devido ao caráter iônicos incentivado pela eletronegatividade de cada átomo. Consequentemente, se cada átomo possui uma capacidade diferente em atrair os elétrons de uma ligação química, a contribuição dessas entidades para a ligação será distinta nas estruturas canônicas de ressonância. A discussão da natureza das ligações ampliou o entendimento da ligação química como puramente covalente como denotado por A:B ou iônica

como exemplificado por $A^+ B^-$ e $A^- B^+$, sugerindo a existência de uma predominância entre esses tipos ao se tratar de uma molécula (Pauling, 1960). O químico corrigiu a proposta anterior a partir da adição de um excesso de energia (Δ) como mostra a (Equação 28).

$$D(A - B) = \frac{D(A-A)+D(B-B)}{2} + \Delta \quad (\text{Equação 28})$$

Pauling (1960) associou ao acréscimo de energia (Δ) o módulo da diferença ao quadrado da eletronegatividade, à qual é simbolizada pela letra grega “chi” – χ , dos elementos químicos genéricos A e B ($|\chi_A - \chi_B|^2$) junto a uma constante de proporcionalidade (c) como exposto na (Equação 29).

$$\Delta = c. |\chi_A - \chi_B|^2 \quad (\text{Equação 29})$$

Pauling (1960) compreendeu que as diferenças da propriedade eletronegatividade intrínseca a natureza dos átomos A e B inferiam sobre as divergentes contribuições iônicas em ligações covalentes. Em vista disso, os resultados experimentais eram maiores que o esperado por Pauling que utilizou os valores de Δ para construção da primeira escala de eletronegatividade. Reorganizando a (Equação 28) para fins de melhor visualização, obtém-se a (Equação 30).

$$\Delta = D(A - B) - \frac{D(A-A)+D(B-B)}{2} \quad (\text{Equação 30})$$

Ao observar a e os dados experimentais, Pauling (1960) acreditou que os valores de Δ seriam sempre positivos, pois a energia de ligação da espécie AB seria maior ou igual à média aritmética de A_2 e B_2 , entretanto isso não era válido para todos os compostos (Pauling, 1960). Para os hidretos alcalinos (MH), Pauling (1960) presumia que as ligações tivessem algum caráter iônico do tipo $M^+ H^-$ e Δ aderisse a valores positivos, contudo a diferença era negativa. Com o auxílio da mecânica quântica, se verificou que a melhor descrição de uma energia de ligação para uma molécula do tipo AB seria fornecida pela média geométrica conforme a (Equação 31), resultando em valores positivos para um novo Δ' .

$$\Delta' = D(A - B) - [D(A - A). D(B - B)]^{1/2} \quad (\text{Equação 31})$$

O rearranjo da (Equação 31) em termo da eletronegatividade (χ) dá origem a (Equação 32).

$$|\chi_A - \chi_B| = c' \left[(D(A-B) - (D(A-A) \cdot D(B-B))^{1/2}) \right]^{1/2} \quad (\text{Equação 32})$$

$$\text{em que } c' = \sqrt{\frac{1}{c}} \quad (\text{Equação 33})$$

A partir da seleção da média geométrica, o módulo do quadrado da diferença de eletronegatividades se manifesta como a (Equação 34). A raiz quadrada de Δ' satisfazia uma relação linear para descrição da diferença de eletronegatividades entre átomos diferentes com base em dados termodinâmicos (Pauling, 1960).

$$|\chi_A - \chi_B| = c' \cdot \left[(D(A-B) - (D(A-A) \cdot D(B-B))^{1/2}) \right]^{1/2} \quad (\text{Equação 34})$$

A diferença de eletronegatividade podia ser comparada e determinada através da (Equação 35) tomando como base de referência o hidrogênio e/ou o flúor. Devido a facilidade em estabelecer ligações químicas com os mais diversos elementos, o hidrogênio exerceu um papel como um padrão de referência para a eletronegatividade e o flúor se estabeleceu como o elemento químico de maior eletronegatividade (Pauling, 1960). Esse padrão de referência junto a escrita da equação em termos de diferença de eletronegatividade permitiu a determinação da eletronegatividade de vários elementos químicos com base em dados termodinâmicos. A constante c' assume o valor 0,18 indicado em literatura, assim a (Equação 34) pode ser reescrita e apresentada como a (Equação 35).

$$|\chi_A - \chi_B| = 0,18 \cdot \left[(D(A-B) - (D(A-A) \cdot D(B-B))^{1/2}) \right]^{1/2} \quad (\text{Equação 35})$$

4.5.2 A escala de eletronegatividade para Mulliken (1934)

O químico e físico norte-americano Robert Sanderson Mulliken criou uma escala de eletronegatividade em 1934 a partir da descrição de função de onda para uma molécula do tipo AB (Ψ_{AB}) de acordo com a (Equação 36).

$$\psi_{AB} = \gamma\psi(AB) + \alpha\psi(A^+B^-) + \beta\psi(A^-B^+) \quad (\text{Equação 36})$$

O cientista ponderou que os coeficientes α , β e γ junto as contribuições iônicas para a molécula diatômica heteronuclear AB não demandariam a mesma quantidade em energia para a formação das entidades com densidades de carga distintas. Isso se deve ao adicional das forças repulsivas atuantes. Mulliken assumiu que para grandes distâncias entre os núcleos (r), as energias de formação das contribuições iônicas seriam iguais e propôs a eletronegatividade em função das propriedades primeira energia de ionização (EI) e afinidade eletrônica (AE), conforme a (Equação 37), de maneira a ser demonstrada empiricamente.

$$\chi_M = \frac{EI + AE}{2} \quad (\text{Equação 37})$$

A afinidade eletrônica (AE) e a energia de ionização (EI) são propriedades periódicas intrínsecas ao átomo. A afinidade eletrônica equivale a diferença de energia entre o estado fundamental do elemento neutro e o estado mais baixo do ânion correspondente, sendo que o átomo e o íon devem estar em fase gasosa e isolados, sendo retratada de forma genérica através da (Equação 37) em que X remete a um átomo (Haynes; Lide; Bruno, 2017).



A afinidade eletrônica depende da carga nuclear efetiva de cada elemento químico e a estabilidade desse em receber um elétron (Atkins; Jones, 2012). Logo, os halogênios possuem valores apreciáveis de afinidade eletrônica, pois costumam apresentar uma carga nuclear efetiva maior quando comparada a de outros elementos já os metais alcalino terrosos são reconhecidos como elementos de baixa afinidade eletrônica.

A energia de ionização, propriedade também usada por Mulliken na descrição da escala, corresponde a energia mínima necessária para remoção de um elétron de um sistema atômico (átomo ou íon monoatômico) gasoso, isolado e no estado fundamental conforme descrito por

Haynes, Lide e Bruno (2017). A primeira energia de ionização de um átomo neutro (X) é ilustrada conforme a (Equação 39).



Essa propriedade também depende da carga nuclear efetiva e da estabilidade adquirida na formação do cátion (Mahan; Meyers, 1995). O comportamento de um elemento químico quanto a tendência de aceitar ou perder um elétron envolve ambas as propriedades. Comparativamente, os elementos químicos que necessitam de valores consideráveis de energia de ionização para liberação de um elétron tendem a apresentar alta afinidade eletrônica. A afinidade eletrônica e a energia de ionização podem ser dadas em elétron-volt (eV) para um sistema atômico isolado ou em quilojoules por mol (kJ mol^{-1}) (Atkins; Jones, 2012).

Segundo Galavotti, Cebim e Bim (2023), a escala de eletronegatividade de Mulliken traz a representação de uma eletronegatividade intrínseca ao elemento, sendo independente do estabelecimento de uma ligação química. Por conseguinte, a escala oferece valores de eletronegatividade para os gases nobres e para elementos em diferentes estados de oxidação (Galavotti; Cebim; Bim, 2023).

4.5.3 A escala de eletronegatividade para Allred e Rochow (1958)

Os químicos norte-americanos Albert Allred e Eugene Rochow propuseram uma escala de eletronegatividade fundamentada na força de atração nuclear entre o núcleo e o elétron em 1958 (Allred; Rochow, 1958). As cargas elétricas são tratadas como cargas pontuais para estimar a força de atração (F) exercida pelo núcleo em relação ao elétron por uma distância equivalente ao raio covalente (r), e é a carga do elétron e Z_{ef} é a carga nuclear efetiva, ou seja, a carga experimentada por um elétron em relação ao núcleo como retrata a (Equação 40) (Allred; Rochow, 1958). Devido as interações elétron-elétron que promovem um efeito conhecido como blindagem (σ), a carga nuclear efetiva atuante sob um átomo é menor que a carga nuclear real daquele elemento químico.

$$F = \frac{(e^2 \cdot Z_{ef})}{r^2} \quad (\text{Equação 40})$$

A força de atração determinada através da expressão acima age como um parâmetro da extensão em que um átomo em uma molécula atrai os elétrons, assumindo o papel de eletronegatividade absoluta de um átomo (Allred; Rochow, 1958).

A determinação da Z_{ef} é feita por meio das regras de Slater. As regras de Slater envolvem o número de elétrons e a localização em níveis de energia para indicar a constante de blindagem característica do elétron de interesse. Como trata Oliveira (2002), cada elétron é submetido a uma constante de blindagem diferente, considerando cada subnível particular. Ao final, as regras de Slater indicam os valores médios das constantes de blindagem para cada tipo de elétron. Calcula-se a Z_{ef} por meio da diferença entre o número atômico do elemento químico em questão (Z) e a constante de blindagem (σ), conforme mostra a (Equação 41).

$$Z_{ef} = Z - \sigma \quad (\text{Equação 41})$$

Allred e Rochow linearizaram a (Equação 40) para que a própria escala pudesse ser correlacionada a escala de Pauling (Allred; Rochow, 1958). Dessarte, Allred e Rochow apontaram os valores de eletronegatividade para 44 elementos químicos através da expressão (Equação 42) (Allred; Rochow, 1958).

$$\chi = 0,359 \cdot \frac{Z_{ef}}{r^2} + 0,744 \quad (\text{Equação 42})$$

4.5.4 A escala de eletronegatividade para Allen (1989)

Em 1989, Leland Allen propôs uma escala de eletronegatividade baseada na energia média dos elétrons em orbitais, sugerindo que deveria existir uma lógica para estimar uma escala de acordo com a organização da Tabela Periódica (ALLEN, 1989). Segundo Allen (1989), a organização da tabela periódica com o aumento do número atômico no decorrer do período e o aumento do número de camadas ao longo da família fornece a previsão de propriedades como a energia de ionização e o raio atômico e, que, provavelmente, a eletronegatividade também pode ser relacionada a essa disposição dos elementos químicos. Essa relação é baseada na equação de Schrödinger, que identifica a energia como o parâmetro central para descrever a estrutura da matéria. A escala proposta por Allen (1989), cuja eletronegatividade é representada por χ_{spec} , entende que essa propriedade corresponde a energia média monoelétrica dos elétrons de valência no estado fundamental, conforme a expressão da (Equação 43).

$$\chi = \frac{(m.E_p) + (n.E_s)}{m+n} \quad (\text{Equação 43})$$

Em que m é o número de elétrons de valência “ p ”, n é o número de elétrons de valência “ s ”, E_p é a diferenças de energia entre o átomo no estado fundamental neutro e o átomo ionizado na camada p , E_s é a diferenças de energia entre o átomo no estado fundamental neutro e o átomo ionizado na camada s , sendo que tais valores são retirados da “*National Bureau of Standard Tables*”

4.5.4.1 Relação do χ_{spec} com os períodos da Tabela Periódica

A relação da eletronegatividade de Allen com os períodos da tabela periódica segue uma organização em que esses valores são, majoritariamente, decrescentes com o aumento dos períodos ao longo de uma mesma família. Isso acontece porque o raio da subcamada aumenta em relação ao anterior, diminuindo assim a energia da camada de valência. Para entender a elevação que acontece nos elementos da terceira e quarta coluna da tabela periódica, a transição ocorre exatamente onde aparecem os elementos que iniciam o preenchimento da camada d (Allen, 1989). Esse comportamento foi registrado por Allen (1989) através de um gráfico como consta na **Figura 38**.

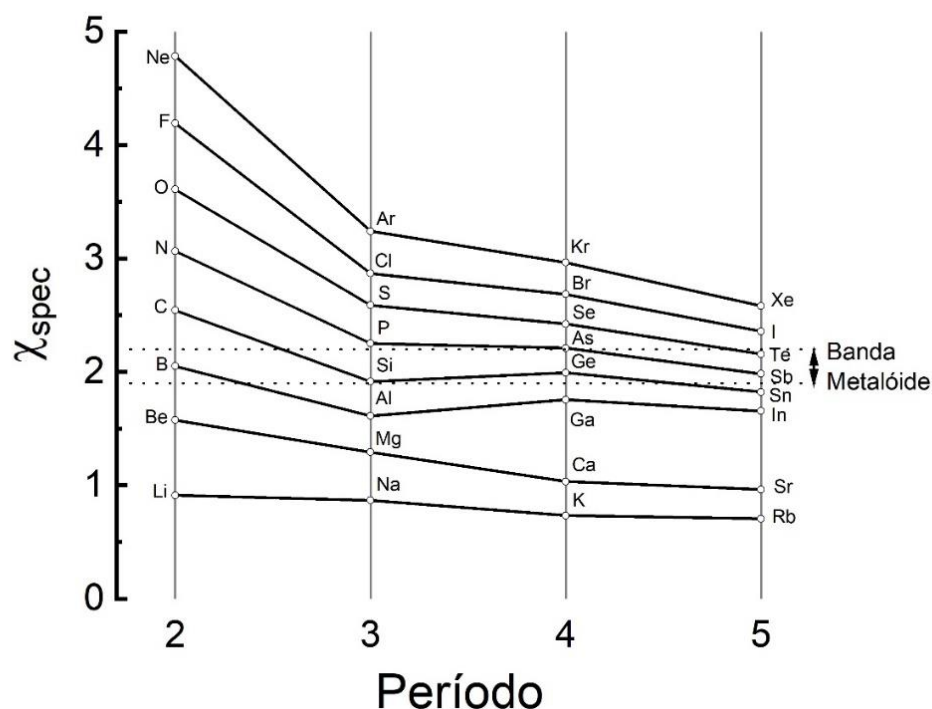


Figura 38 - Relação do χ_{spec} com o período da tabela periódica.

Fonte: Allen (1989).

Ao observar a **Figura 38**, se nota que os gases nobres, representados por uma linha superior, possuem maior energia, e, assim, não apresentam tendência para ionização e formação de ligações. Entretanto, vê-se que alguns elementos como criptônio (Kr) e xenônio (Xe) apresentam um valor relativo de χ_{spec} inferior a outros elementos que não são gases nobres, como, por exemplo, o flúor (F). Isso é um indício de uma explicação de porque é possível encontrar o KrF_2 , o ArF_2 , e o XeO (Allen, 1989).

4.5.4.2 Relação do χ_{spec} com os grupos da tabela periódica

Ao analisar a representação gráfica da eletronegatividade de Allen (1989) com os grupos (famílias) da tabela periódica percebe-se que padrão de inter-relacionamentos exibido é diferente de forma significativa a **Figura 39**. Para cada família, χ_{spec} aumenta de maneira quase linear com o número atômico (Z). Há uma elevação não linear quando existe o orbital d preenchido entre os orbitais s e p, além de uma redução na inclinação das retas (menor derivada) após o preenchimento do orbital d. Isso acontece em razão do aumento dos raios atômicos que levam a um conjunto ordenado de valores. Observando os elementos cloro (Cl) e nitrogênio

(N), as eletronegatividades pelas escalas de Pauling e Allred-Rochow apontam que a do cloro (3,535) é maior que a do nitrogênio (3,083). Mas pelo valor de χ_{spec} ocorre o inverso.

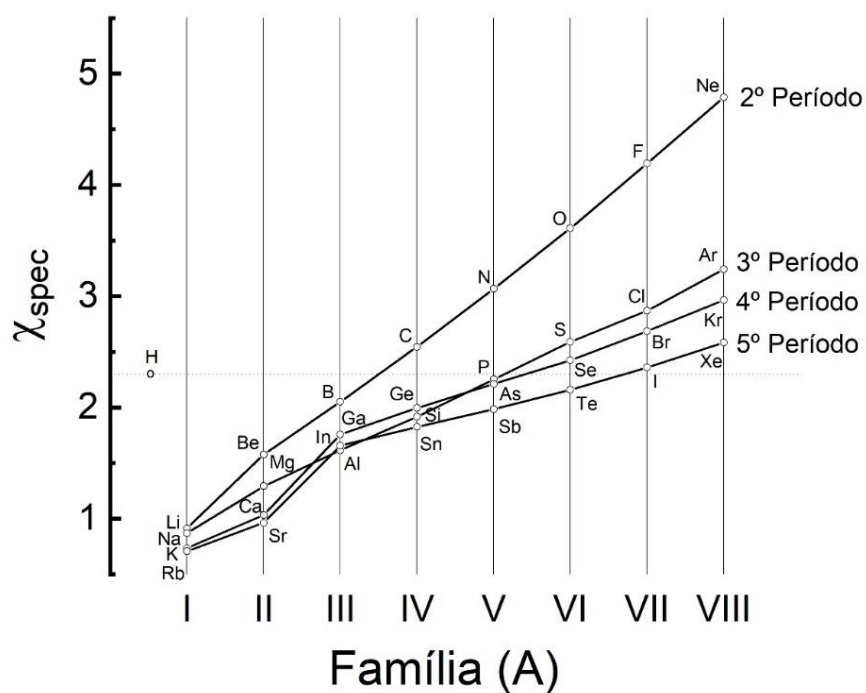


Figura 39 - Relação χ_{spec} com os grupos da tabela periódica.

Fonte: Allen (1989).

4.5.4.3 Comparação entre χ_{spec} e os dados de Pauling e Allred-Rochow

Comparações entre as escalas de Allen (1989), Pauling (1932) e Allred-Rochow (1958) foram apresentadas através da **Figura 40**.

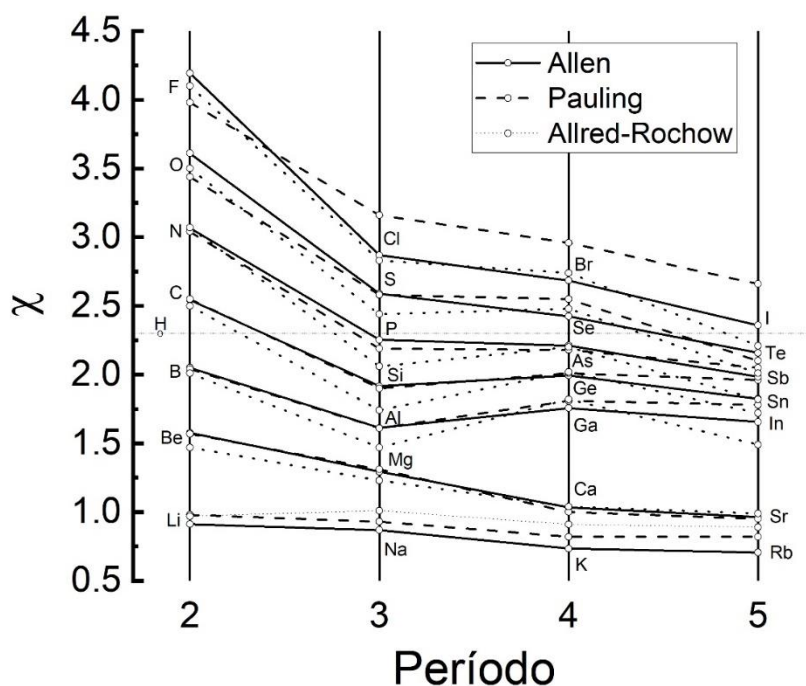


Figura 40 - Comparação entre os modelos de eletronegatividade de Allen, Pauling e Allred-Rochow.

Fonte: Allen (1989).

Ao comparar o valor experimental de χ_{spec} , com as escalas de Pauling e Allred-Rochow, para os elementos F e O, os resultados são entre 1% e 2% mais altos. Isso ocorre devido a sua considerável densidade eletrônica, produzindo assim correções de energia de correlação elétron-elétron diferencialmente altas quando se ligam para formar moléculas ou sólidos. Ainda observando χ_{spec} , e comparando os valores do Grupo I, da mesma forma, a eletronegatividade de Allen (1989) pode ser de 5% a 6% mais baixa, devido a transferência de carga diferencialmente alta que pode ser esperada quando eles se ligam a sólidos ou moléculas. Para os elementos químicos cloro (Cl) e nitrogênio (N), as eletronegatividades pelas escalas de Pauling e Allred-Rochow apontam que a do cloro (3,535) é maior que a do nitrogênio (3,083). Mas pelo valor de χ_{spec} , ocorre o inverso, com a do cloro (2,869) menor que o nitrogênio (3,066).

4.4.5.4 Comparação entre $\Delta\chi_{spec}$ e triângulo de Ketelaar

Através da comparação entre $\Delta\chi_{spec}$ e Triângulo de Ketelaar, para determinar o caráter iônico de uma ligação, usa-se a expressão $\chi_A - \chi_B$. Ou seja, vale a (Equação 44).

$$\chi_{specA} - \chi_{specB} \quad (\text{Equação 44})$$

Assim, o caráter iônico ou a polaridade de uma ligação do tipo AB é identificada através da (Equação 45).

$$\Delta\chi_{spec} = \chi_{specA} - \chi_{specB} \quad (\text{Equação 45})$$

Tanto $\Delta\chi_{spec}$ como a tabela periódica trazem os três tipos de ligações (covalentes, metálicas e iônicas). O triângulo de Ketelaar, de vértices rotulados como covalente, metálico e iônico, ajuda a visualizar o caráter predominante – (**Figura 41**). As ligações covalentes e metálicas são reconhecidas como originárias das mesmas forças da mecânica quântica básica. Portanto, mover-se neste lado do triângulo significa mover-se da direita para a esquerda na tabela periódica.

No Lado Covalente-Metálico do triângulo de Ketelaar estão localizados os Semicondutores. Para eles, existe uma banda específica de valores para χ_{spec} e $\Delta\chi_{spec}$. São exemplos de semicondutores os sólidos covalentes de elementos de banda metalóide, e compostos binários com um metalóide, e binários abrangendo esta banda.

No Lado Iônico-Covalente do triângulo de Ketelaar estão localizados os compostos binários típicos. Para eles, nota-se a diminuição do $\Delta\chi_{spec}$. São exemplos de compostos binários típicos os fluoretos de elementos representativos, os sólidos poliméricos, os compostos iônicos e moléculas discretas ligadas covalentemente, e os materiais poliméricos.

No Lado Iônico-Metálico do triângulo de Ketelaar, indo do lado metálico para iônico, $\Delta\chi_{spec}$ caracteriza a mudança sequencial de metais puros para cristais iônicos. A escala de metais puros para cristais iônicos varia de mais metálico, intermediária, e mais iônico.

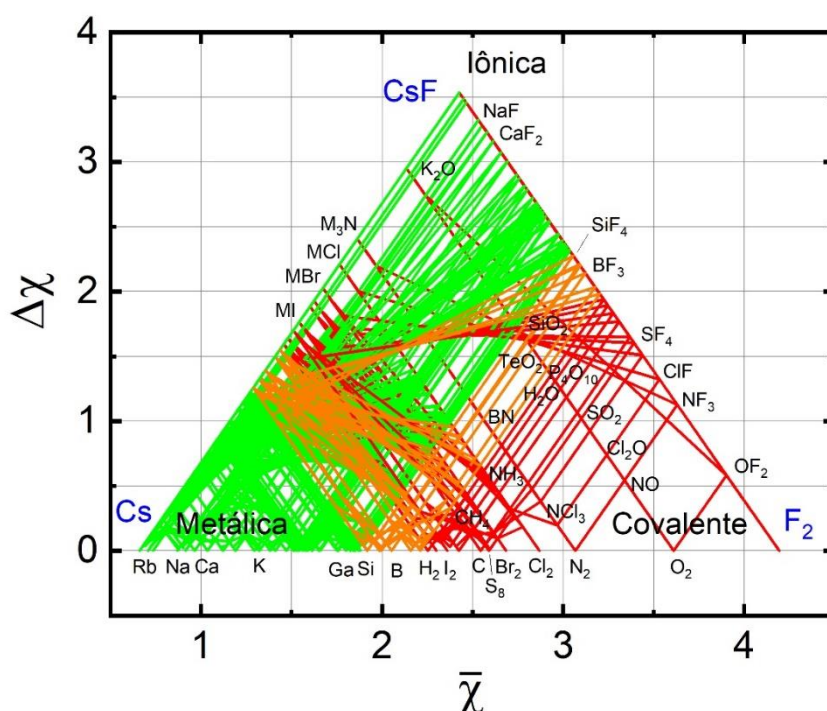


Figura 41 - Triângulo de van Arkel-Ketelaar.

Fonte: Adaptado de Weller *et al.* (2017, p. 60).

O valor de χ_{spec} parece determinar a variação entre elementos diatômicos (F_2 , O_2 , N_2) para metais (Li, Na) enquanto $\Delta\chi_{\text{spec}}$ parece determinar a polaridade das ligações heteronucleares, por exemplo, HF comparado a H_2 e F_2 . Assim, χ_{specH} e χ_{specF} são necessários para construir o diagrama usual de nível de energia orbital molecular comumente empregado para explicar a ligação em HF. A diferença nessas energias médias de um elétron mede a mudança na distribuição de carga molecular que dá origem à polaridade da ligação HF.

A eletronegatividade de Allen acompanha a tendência apresentada por Pauling de que os átomos com maior eletronegatividade se encontram ao lado direito da tabela periódica (**Figura 42**). Através da escala de Allen (1989), a eletronegatividade dos gases nobres pode ser estimada, indicando que os elementos dessa família são os mais eletronegativos da tabela periódica. Em sequência, os halogênios seguem como elementos bastante representativos da capacidade de atração eletrônica. Os metais alcalinos e alcalino-terrosos mantêm a baixa eletronegatividade.

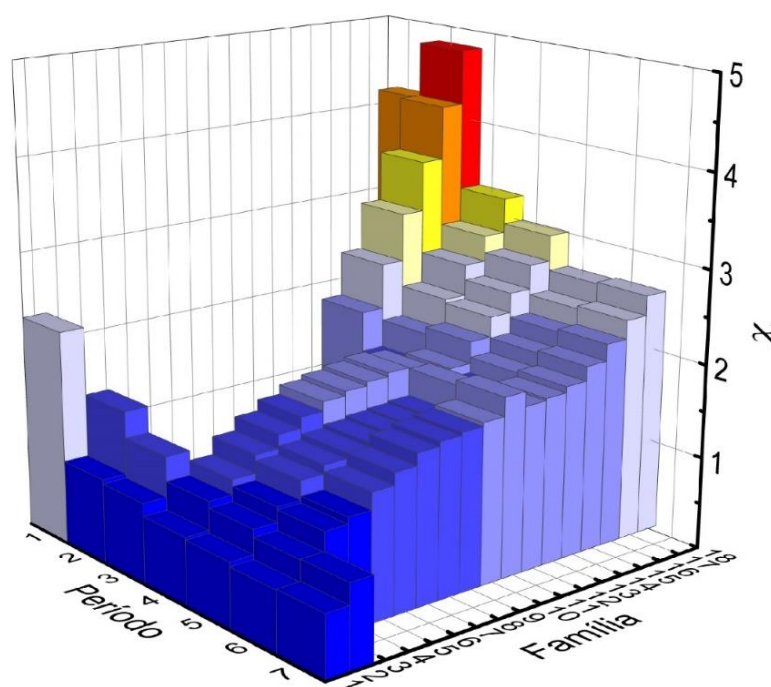


Figura 42 - Representação gráfica da eletronegatividade dos elementos químicos segundo a escala de Allen.

Fonte: Obra dos autores.

4.6 REFERENCIAL TEÓRICO-METODOLÓGICO

Para abordagem da TOM na UDM direcionada aos estudantes do primeiro ano do curso Bacharelado em Química da UNESP – Araraquara, será utilizado o Ensino Fundamentado em Modelagem como metodologia de Ensino. Em razão da estruturação deste trabalho, destaca-se essa metodologia como um referencial teórico-metodológico que será explorado também na seção “Percurso metodológico”.

Mas, o que é a modelagem? O que são modelos?

O significado de modelo tem sido discutido por cientistas, educadores, filósofos da Ciência, linguistas e psicólogos, porém não há um consenso para sua definição (Justi, 2006). De acordo com Gilbert, Boulter e Elmer (2000), no meio científico o modelo corresponde a representação de um fenômeno inicialmente produzido para um propósito específico. Os autores explicam que os modelos são onnipresentes, pois atuam como um fenômeno que é uma forma intelectualmente interessante de segregar uma parte do todo tal como vivenciado para estudo aprofundado. Sendo assim, o propósito específico para o qual os modelos são produzidos

em uma investigação científica é ser uma simplificação de um fenômeno a ser utilizado em investigações para desenvolver explicações do mesmo (Gilbert; Boulter; Elmer, 2000). Dessa forma, um modelo corresponde a uma representação parcial de uma entidade, elaborado com um, ou mais, objetivo(s) específico(s) e que pode ser modificado (Gilbert; Boulter; Elmer, 2000).

Justi (2015) faz considerações importante sobre a definição de “modelos”. A autora alerta para o aspecto da representação. Representar corresponde a um caráter parcial, o que alcança o “abstrai a partir de” e o “traduz em outra forma” a natureza real do que se coloca como referência (JUSTI, 2015). Quando os modelos são interpretados como representações parciais, afirma-se que eles não são a realidade, não são cópias da realidade e possuem limitações por sua própria essência (Justi, 2015). Portanto, os modelos são ferramentas a serem usadas a serviço da Ciência, movimentando a produção de conhecimento e funcionando como um dos produtos da própria Ciência (Justi, 2015). Consequentemente, os modelos são amplamente usados na Ciência e na Filosofia atuando como base da teoria por exercerem o papel de instrumento de produção do conhecimento, sendo fundamentais na pesquisa científica. O conhecimento científico está relacionado com uma produção de diversos modelos de diferentes abrangências que obtêm uma capacidade de previsão de resultados ou eventos (Maia, 2006).

E quais entidades podem ser modeladas?

Os modelos podem representar entidades concretas ou abstratas (Gilbert; Boulter; Elmer, 2000). À um objeto concreto pode ser simbolizado uma parte desse ou o todo. Exemplificando, pode-se tomar um carro a ser retratado inteiramente ou seu conjunto de rodas. Por ser um retrato, o tamanho pode variar, então o modelo do carro pode ser menor ou maior que o real. Os modelos abstratos exprimem isso também, afinal tomando a representação de uma célula como exemplo encontra-se essa em tamanho maior que o real.

Além dos modelos poderem ser objetos, como os brinquedos de infância que recordam aviões, motos, casas, entre outros, há a capacidade de externalizar compostos de abstrações como a energia. É possível que um conjunto de entidades concretas, como objetos de massa m , e de entidades tratadas como se fossem concretas, como as forças atuantes nesses objetos, sejam representadas por modelos. Os modelos podem simbolizar ideias e processos (Gilbert; Boulter; Elmer, 2000). Um modelo pode ser um aglomerado de entidades relacionadas, como as estações de metrô vinculadas a uma central. Um modelo pode ser a ideia de um experimento científico realizado dentro da mente, um modelo mental (Gilbert; Boulter; Elmer, 2000).

Gilbert, Boulter e Elmer (2000) classificam de maneira ontológica os modelos. Para os autores, o modelo mental consiste em uma representação cognitiva privada e pessoal, sendo formado por um indivíduo sozinho ou dentro de uma equipe. O modelo mental pode ser manifestado gerando um modelo expresso. Esse modelo expresso é posto em público por um indivíduo ou uma equipe para que os outros interajam com aquilo por meio de modos de representação que será visto mais adiante.

Processos experimentais e discussões acerca de um modelo expresso podem ser realizados por vários grupos sociais que, caso entrem em consenso sobre o valor desse, produzem um modelo consensual. Ao se tratar da aprovação de uma comunidade científica que parte de toda uma metodologia investigativa formal e aceita pelos pares, reconhece-se como um modelo científico. O modelo científico cumpre um importante papel no decorrer de uma investigação científica enquanto é útil para a capacidade de previsões (Gilbert; Boulter; Elmer, 2000).

No decorrer do tempo, os modelos consensuais projetados em contextos históricos específicos são substituídos por novos modelos que forneçam de maneira mais completa as informações a serem representadas. Dessarte, os modelos consensuais passam a ser reconhecidos como modelos históricos. Caso um modelo científico ou histórico seja incluso em um currículo formal, torna-se um modelo curricular.

O uso da modelagem como forma de abordar o Ensino de Química, pode levar a atuação do aluno como um sujeito ativo no processo de ensino e aprendizagem segundo Justi (2012). Da modelagem depreende-se ainda o uso dos conhecimentos prévios dos alunos para a construção e reformulação dos modelos. Segundo Justi (2012), o processo de ensino baseado na modelagem permite uma compreensão sobre a construção da Ciência já que construir, refletir e elaborar modelos faz parte das atividades dos cientistas. Se a construção de modelos constitui a base do processo de pesquisa científica, então conhecer a abrangência e a relevância da modelagem significa conhecer a base do conhecimento. Logo, o processo de modelagem trabalha no campo do Ensino com a construção do conhecimento. Isso faz com que o aprendizado se baseie no entendimento, e não apenas na memorização. Uma vantagem desse modo de aprendizado é o desenvolvimento de um conhecimento crítico e mais flexível, podendo ser expandido para outras aplicações. Para o discente, o efeito do aprendizado baseado em modelagem permite a criação de seus próprios modelos. Esse processo também colabora para que haja entendimento de como outros modelos são criados, estimulando reflexões críticas (Maia, 2006).

Considera-se que a modelagem ocorre a partir de elaboração de um modelo mental, da expressão desse modelo, tornando-o um modelo expresso, o teste a ser realizado sob essa representação e a identificação de abrangências e limitações, sendo que tais etapas serão descritas na seção do “Percurso metodológico”. Dessa maneira, entende-se que a aprendizagem sobre as ligações químicas pode ser feita de modo dinâmico, participativo e coerente com as orientações curriculares oficiais sobre a TOM com o auxílio da modelagem.

Uma autora expoente da modelagem no Brasil é a docente Rosário da Silva Justi da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). No trabalho “Relações entre argumentação e modelagem no contexto da Ciência e do Ensino de Ciências”, Justi (2015) ressalta a aproximação da argumentação e da modelagem no Ensino como práticas epistêmicas que podem promover um Ensino de Ciências autêntico, recorrendo sobre o significado dessas práticas e a aproximação entre elas que, segundo a autora, favorece o desenvolvimento do conhecimento. Nesse trabalho, a autora discute também que a modelagem é analisada sob diferentes perspectivas, visto que, podem ser avaliados a produção, a validação, a utilização e os próprios cientistas envolvidos. Junto a Poliana Flávia Maia, docente da Universidade Federal de Viçosa (UFV), Justi publicou vários trabalhos e desenvolveu projetos. Dentre as obras publicadas, está a dissertação de mestrado que trata sobre uma proposta de modelagem para o Ensino Médio acerca do tema equilíbrio químico “Modelagem e suas contribuições para o Ensino de Ciências: uma análise do estudo de equilíbrio químico.” Junto a John Gilbert que foi docente da Universidade de Reading na Inglaterra e editor do *International Journal of Science Education*, Justi escreveu o livro “*Modelling-based Teaching in Science Education*.” Os autores revisam a literatura sobre modelagem e propõe um modelo sobre essa prática, estabelecendo conexões entre a aprendizagem de conceitos científicos junto a argumentação e ao raciocínio. Na obra, os autores defendem que a modelagem deve compor o currículo escolar a fim de proporcionar um ensino autêntico em que há mudança em relação a uma abordagem baseada unicamente na transmissão de conteúdo.

5 PERCURSO METODOLÓGICO

Segundo Menegolla e Sant'Anna (2005), uma ação do homem é o ato de planejar em que se faz uso da razão e se pensa sobre seus movimentos no passado, presente e futuro, de maneira que isso seja uma realidade que acompanha a trajetória histórica da humanidade. O assunto foi discutido também por Martinez e Oliveira Lahone (1978) que interpretaram o planejamento como um processo de previsão de necessidades e racionalização de emprego dos meios materiais e dos recursos humanos disponíveis, com a intenção de alcançar objetivos, em prazos especificados e em etapas definidas, a contar do conhecimento e avaliação científica da situação original. A descrição dada por Martinez e Oliveira Lahone (1978) remete a um planejamento que não é específico, todavia contém elementos básicos que delineiam as características de um planejamento.

Dentre as características que acompanham o planejamento, estão o conhecimento da realidade e das necessidades vigentes para que possa atender a um objetivo esperado (Menegolla; Sant'Anna, 2005). Esse objetivo deve ser claro e factível de ser atingido, tendo meios pré-determinados e viáveis para sua concretização. O próprio estabelecimento de objetivos indica que há um processo a se seguir para cumpri-lo, havendo, portanto, etapas para executá-lo (Menegolla; Sant'Anna, 2005).

Quando se trata do campo educacional, a utilização do planejamento reflete na valorização integral do ser humano, impulsionando uma formação consciente e libertadora o que direciona todo o processo educacional à necessidade do planejamento (Menegolla; Sant'Anna, 2005). O planejamento deve orientar o processo educacional em quaisquer esferas: nacional, estadual, escolar ou relativa às disciplinas e ao conteúdo. Conforme expresso por Menegolla e Sant'Anna (2005), apesar do planejamento indicar os meios e recursos disponíveis para a conquista dos objetivos, esse não deve ser confundido como uma planificação de atividades.

De acordo com Haydt (2011), há vários níveis de planejamento na esfera educacional. Há o planejamento de um sistema educacional, o escolar, o curricular e o didático ou de ensino. Esse último corresponde ao processo em que o docente organiza as ações e os procedimentos de suas atividades com vistas de atender aos objetivos educacionais estabelecidos segundo as necessidades e possibilidades da comunidade escolar.

A discussão de planejamento na área educacional, segundo Veiga (2005), enfrentou um período de resistência por parte da comunidade escolar. Uma concepção vindoura por algum tempo consistiu na assimilação de que a escola tinha um papel de controle sob os indivíduos,

reproduzindo as condições predominantes na sociedade, relevando um ato de negação ao planejamento. Por algum tempo, a ação de planejar foi vista também como uma padronização do trabalho docente, adquirindo certa tendência tecnicista (Veiga, 2005). Essas concepções negativas se desenvolveram fértilmente no contexto da ditadura militar. Dentre as marcas deixadas pelo período, Souza e Tavares (2014) destacam que a gestão educacional esteve atrelada fortemente a um modelo técnico de planejamento para garantir o controle. Os autores discorrem sobre as relações entre o planejamento educacional do país e o plano geral de governo mostrando que a harmonização entre eles foi o argumento usado na época para submeter a educação ao domínio dos técnicos administrativos, revelando dezenas de manuais e cursos direcionados a rede escolar. De acordo com Fusari (1990), em sala de aula havia um meio de controle que consistia nos planos de ensino elaborados pelos professores que passavam por um treinamento sobre planejamento, evidenciando os aspectos burocráticos, mecânicos e autoritários. Aliado a isso, há de se salientar que, ao longo dos anos, a precarização do trabalho docente através da jornada extensa e pouco valorizada fomentou a resistência da classe trabalhadora ao planejamento (Farias, *et al.*, 2008).

Há autores, entretanto, que reforçam o planejamento como atividade de ensino fundamental para evitar ou minimizar a improvisação em sala de aula, promover a eficiência do ensino, garantir maior segurança e colaborar na conquista dos objetivos previamente definidos, sendo, portanto, um auxiliar do docente na execução da função profissional (Piletti, 2004). Libâneo (1990) trata o planejamento como prática importante à docência, pois o mesmo colabora na definição dos princípios orientadores das ações a serem tomadas em resposta aos objetivos, ao conteúdo, ao método, aos recursos disponíveis e avaliações coerentes ao processo.

Na construção do planejamento é importante que alguns princípios sejam seguidos. Haydt (2011) explica que o planejamento didático do professor deve apresentar as correlações os objetivos, os conteúdos, os métodos e as formas de avaliação de forma coerente. Para que essas correlações conversem entre si, o planejamento deve atender uma sequência que integre todas essas partes. E, apesar de imprevistos poderem ser minimizados através do planejamento, como já mencionado por Piletti (2004), há a possibilidade de surgirem. Por conta disso, o planejamento deve ser flexível, podendo ser reajustado de acordo com as necessidades dos alunos. Assim, o planejamento deve se adaptar a discussões não previstas, a questões pertinentes e a subtemas não previstos, tomando-se cautela em não abandonar o tema central. E, por conseguinte, deve haver uma distribuição adequada do trabalho em relação ao tempo disponível e a realidade do meio que é vivenciado (Haydt, 2011).

Além desses elementos elencados por Haydt (2011), a autora destaca que o docente deve levar em consideração a realidade do meio que está inserido, ou seja, o contexto escolar quanto aos recursos disponíveis, as diretrizes educacionais vigentes e a vivência dos estudantes. Logo, o planejamento deve atender às necessidades dos alunos de maneira efetiva, funcional e prática.

Sendo o planejamento uma ação, é relevante destacar que não há neutralidade nesse ato (Farias *et al.*, 2008). Os autores afirmam que o planejamento é uma atividade historicamente voltada para a manutenção ou para a mudança de acordo com a sua intencionalidade. Consequentemente, o professor tem um papel fundamental na construção do seu próprio planejamento. Em contraposição ao aspecto tecnicista apresentado anteriormente, Farias *et al.*, (2008) defendem que o planejamento seja uma ação reflexiva, viva e contínua. Esse processo, além do que já foi exposto, é também político, pois exige escolhas teóricas, de conteúdo, de metodologia e de olhar sob o público. Os autores acrescentam que planejar é uma atitude ética, pois é movida por valores, ideias e crenças de quem os pratica (Farias *et al.*, 2008).

5.1 Unidade Didática Multiestratégica: uma forma de planejar

Dentre as maneiras que o professor pode organizar a sua prática docente são encontradas em literatura, por exemplo, a sequência didática do professor Antoni Zabala (1998), a sequência didática com problematização dos professores Marcelo Giordan e Yara Guimarães, entre outros modelos. Um modelo que se insere nesse contexto da ação de planejar é a Unidade Didática Multiestratégica (UDM) do professor Amadeu Moura Bego. A UDM consiste em um projeto de ensino que integra, de modo organizado e sequenciado, um conjunto de estratégias didáticas de acordo com objetivos de aprendizagem definidos (Bego, 2016).

Bego e Sgarbosa (2016) pontuam que o planejamento de uma UDM é feito a partir de sete seções principais como esquematizado na **Figura 43**: contexto da intervenção didático-pedagógica; análise científico-epistemológica; análise didático-pedagógica; abordagem metodológica; seleção de objetivos e estratégias de avaliação; seleção de estratégias didáticas e de instrumentos de avaliação. Essas seções orientam a UDM de modo que ela seja composta por um conjunto de sequências didáticas (SD's). Cada SD presente na UDM possui um objetivo específico atrelado que responde à intencionalidade de aprendizagem do professor para com o aluno naquele momento. Ao final, o conjunto formado por todas as sequências didáticas ordenadas constitui uma unidade didática (UD) com um objetivo geral. Não há quantidade específica de SD para construir uma UDM, porém é importante salientar que o número de SD's depende do montante de objetivos específicos que moldam as etapas intermediárias

imprescindíveis para a concretização do objetivo geral de aprendizagem da UDM (Ferrarini, 2020).

No caso da UDM, a sua constituição prevê o uso de estratégias didáticas variadas ao longo das sequências de acordo com o conteúdo, o contexto de atuação, os recursos disponíveis e a concepção de avaliação do professor.

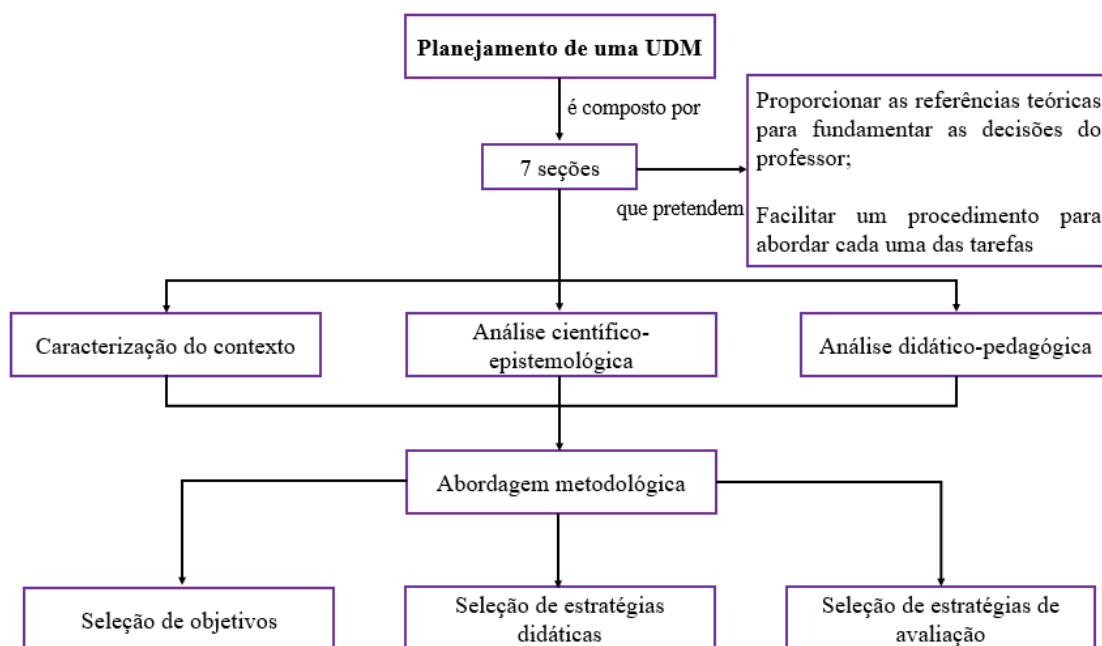


Figura 43 - Organização da UDM.

Fonte: Adaptado de Ferrarini (2020).

Na seção “Contexto da intervenção didático-pedagógica” ocorre a caracterização do ambiente escolar e do perfil dos estudantes, conforme representado no **Quadro 1**. De acordo com Bego e Sgarbosa (2016) o trabalho escolar envolve aspectos objetivos de natureza organizacional-estrutural e de natureza político-ideológica. A natureza organizacional-estrutural se refere as condições de infraestrutura, financeiras e materiais de uma instituição escolar. Além dessas, também reflete o regime de trabalho (Bego; Sgarbosa, 2016). Já a natureza político-ideológica se relaciona com as concepções pedagógicas, como o modo de organização e utilização do tempo e uso dos espaços formais ou não formais de aprendizagem, a organização dos trabalhos dos profissionais escolares, entre outros (Bego; Sgarbosa, 2016).

A sala de aula pertence a uma instituição que possui determinada infraestrutura, organização e história. Além disso, carrega valores e ideias que a compõem de forma a

condicionar as atividades a serem desenvolvidas em sala de aula. A caracterização da escola permite também reconhecer o local em que se insere, sendo ele urbano ou rural, tendo facilidade de acesso, transporte público, proximidade com teatros, museus, praças, entre outros. Segundo Bego e Sgarbosa (2016) é necessário reconhecer que os processos de ensino e aprendizagem que acontecem em sala de aula devem ser considerados como eventos histórico e socialmente situados. Dessa forma, é possível superar uma visão fragmentada e ingênua da prática pedagógica (Bego; Sgarbosa, 2016). Consequentemente, compreende-se que a primeira seção da UDM caracteriza o contexto que o professor faz parte.

Contexto da intervenção didático-pedagógica	
Nome da unidade educacional	
Endereço completo	
Site e e-mail	
Caracterização da unidade educacional	
Disciplina	
Ano/turma	
Professor responsável	
Número de estudantes	
Caracterização dos estudantes	

Quadro 1 - Primeira seção da UDM: Contexto da intervenção didático-pedagógica.

Fonte: Adaptado de Bego e Sgarbosa (2016).

A seção “Análise científico-epistemológica” reúne o tema da UDM, os pré-requisitos exigidos para o seu desenvolvimento, as orientações curriculares oficiais e um mapa conceitual para explicitar as relações entre os conceitos ao invés de tratar os conteúdos de forma isolada -

Quadro 2.

Na “Análise científico-epistemológica”, o “Conteúdo programático da UDM” informa o tema a ser trabalhado enquanto a área dos “Pré-requisitos para a UDM” exerce um papel de integração entre os conceitos necessários para a tratativa do assunto em questão, além de atender ao currículo vigente (Bego; Sgarbosa, 2016). A parte das “Orientações curriculares oficiais sobre o tema” lembra que, embora o docente tenha autonomia no exercício de sua função, não há independência plena. Isso ocorre porque o professor responde a uma instituição de Ensino que compõe um sistema educacional regido por leis e diretrizes orientadoras (Bego; Sgarbosa, 2016). Logo, o tema a ser desenvolvido deve responder aos anseios educacionais documentados pela esfera pública.

O campo dos “Conteúdos conceituais” se refere aos conceitos científicos associados ao tema e que serão trabalhados junto aos discentes (Bego; Sgarbosa, 2016). Esses conteúdos são interpretados por Mortimer, Machado e Romanelli (2000) de maneira a serem divididos em três aspectos do conhecimento químico, sendo eles: aspecto fenomenológico, aspecto representacional e aspecto teórico.

O aspecto fenomenológico corresponde aos fenômenos de interesse da química perceptíveis ou não a olho nu, como a mudança de estado físico da água e ou as interações entre radiação e matéria detectadas por espectroscopia (Mortimer; Machado; Romanelli, 2000). Já o aspecto representacional reúne a simbologia dos conteúdos químicos, voltando-se para a linguagem de modelos químicos como as reações, fórmulas, equações e gráficos (Mortimer; Machado; Romanelli, 2000). O aspecto teórico envolve informações de natureza atômico-molecular o que faz com que haja a inclusão de modelos para tratar de entidades abstratas como os átomos e as moléculas (Mortimer; Machado; Romanelli, 2000).

Assim, essa área de conteúdo registra os conceitos científicos por meio desses três aspectos do conhecimento químico, auxiliando o professor no reconhecimento da conexão entre os símbolos, modelos teóricos e experimentais.

A parte “Esquema conceitual científico sobre o objeto de estudo da unidade didática (mapa conceitual)” se refere a uma ampla representação das relações conceituais associadas ao tema a fim de superar a fragmentação dos conceitos. Dessa maneira, a preparação das aulas adquire um caráter com maior coerência entre os conceitos químicos (Mortimer; Machado; Romanelli, 2000).

Análise Científico-Epistemológica	
Conteúdo programático da UDM	
Pré-requisitos para a UDM	
Orientações curriculares oficiais sobre o tema	
Conteúdos conceituais - Identificação dos fatos e/ou fenômenos de interesse (aspecto fenomenológico); - Interpretação de fatos (aspectos teórico e simbólico)	
Perfil conceitual ou desenvolvimento histórico do conceito principal da UDM (mapa conceitual)	
Esquema científico sobre o conteúdo conceitual da UDM	
Referências (ABNT NBR 6023)	

Quadro 2 - Segunda seção da UDM: Análise didático-epistemológica.

Fonte: Adaptado de Bego e Sgarbosa (2016).

Essa segunda tarefa reúne, portanto, o conteúdo científico a partir dos níveis de conhecimento químico, organizando as relações a serem estabelecidas com auxílio das orientações oficiais (Bego; Sgarbosa, 2016).

Segundo Bego e Sgarbosa (2016), a seção “Análise didático-pedagógica” é dividida em três partes: Conhecimentos prévios dos alunos sobre o tema da unidade didática, Obstáculos epistemológicos particulares relacionados aos conteúdos da UDM e Implicações para o ensino dos conteúdos de ensino da UDM, conforme o **Quadro 3**.

O reconhecimento das concepções prévias registradas em literatura sobre determinado conteúdo permite ao docente se preparar em benefício da aprendizagem. Logo, se torna possível se antecipar frente as dificuldades dos alunos e buscar propostas de ensino que permitam superá-las. Esse levantamento contido no segmento “Ideias prévias dos alunos sobre os conteúdos da UDM (concepções alternativas)” é feito a partir dos dados da literatura acadêmica e científica acerca de investigações em espaços de aprendizagem.

O campo “Obstáculos epistemológicos particulares relacionados aos conteúdos da UDM” remete aos obstáculos epistemológicos propostos por Gaston Bachelard como barreiras que dificultam a aprendizagem do conteúdo científico Bachelard (1996). Os obstáculos são divididos nas categorias: experiência primeira, verbal, conhecimento geral, conhecimento unitário e pragmático, substancialista, realista e animista Bachelard (1996).

O obstáculo de experiência primeira provém do pensamento antes da crítica, de um conhecimento comum a partir da ausência do espírito científico. Esse obstáculo é carregado de imagens imediatas, fáceis, pitorescas, concretas que, em um primeiro momento, parecem corretas. A barreira oriunda desse obstáculo promove analogias e representações muitas vezes equivocadas, podendo ser interpretado como um obstáculo que lembra o conhecimento de senso comum, revelando riscos de conclusões rápidas Bachelard (1996). As experimentações, quando tratadas de forma imediata, podem conduzir o espectador a se atentar somente para as mudanças de cor, por exemplo, em detrimento das hipóteses daquele fenômeno. Logo, o observador é também iludido pelo deslumbre colorido de um experimento por exemplo. Como tal, quando são observados os halogênios – $F_{2(g)}$, $Cl_{2(g)}$, $Br_{2(l)}$ e $I_{2(s)}$ – sem discussão do motivo de se apresentarem diferentes a olho nu quanto a cor e ao estado físico.

O obstáculo verbal é caracterizado pelo uso de imagens, metáforas e analogias que distanciam o indivíduo do conhecimento científico. Nesse sentido, ganham um grande destaque na oposição à ruptura entre o conhecimento comum e científico, pois podem assumir uma forma explicativa de todo um fenômeno Bachelard (1996). Um exemplo são as analogias que se aplicam aos modelos atômicos, promovendo resistência a visão abstrata do fenômeno e gerando uma falsa explicação.

O obstáculo do conhecimento geral parte das generalizações feitas como consequências de experiências primeiras e que acabam por guiar leis gerais sem grandes questionamentos sobre a sua abrangência e variações empíricas. Em sua obra, Bachelard (1996) aponta que é necessário abandonar o empirismo imediato, pois as generalizações imobilizam o conhecimento científico ao dar-lhe um aspecto único. Assim, para o autor, as generalizações devem ser feitas com cautela, pois há muitos casos particulares que dependem de uma complexidade de variáveis que precisam ser entendidas para que o conhecimento científico seja efetivamente alcançado. Um exemplo dado por Bachelard (1996) consiste na generalização, por parte dos indivíduos, de que todos os corpos caem buscando seu lugar natural a partir do entendimento do filósofo Aristóteles.

O obstáculo do conhecimento unitário e pragmático traz uma supervalorização do fenômeno colocando à parte do pensamento crítico. Esse conhecimento é formado por um

conjunto de impressões, sentimentos e concepções de natureza intuitiva o que fomenta uma valorização do fenômeno de tal maneira que esse adquira prestígio. Esse prestígio assume um caráter divino. Esse caráter oferece ao espírito pré-científico noções de que a unidade é um princípio realizado sem esforço em que as variadas atividades naturais são reflexo de uma só natureza e a dualidade é suprimida. Consequentemente, o movimento dos corpos celestes e a criação do Universo são colocados sob ordem do Criador de maneira que discussões a respeito da física sejam colocadas à parte em nome da unidade. Logo, o conhecimento unitário abrange muito mais generalizações que o conhecimento geral. Além disso, há a necessidade de atribuir alguma utilidade ao fenômeno, caracterizando o pragmatismo. Assim, o aspecto unitário e pragmático desse conhecimento está na atribuição de que várias atividades naturais provêm de uma única natureza, reforçando generalizações e resistindo a novas relações e contrapontos Bachelard (1996).

O obstáculo substancialista atribui propriedades a uma entidade de forma a descrevê-la como um todo, desconsiderando as particularidades e/ou as condições químico-físicas. Desse modo, é atribuído a uma substância inúmeras qualidades, sendo essas profundas ou superficiais, impedindo a visualização de relações entre propriedades Bachelard (1996). As características de um metal como a dureza e a condutividade elétrica, por exemplo, servem de obstáculo substancialista quando não são discutidas com profundidade junto a Teoria do Orbital Molecular, as bandas de valência e de condução, reforçando características a todos os metais. Outra exemplificação consiste em atribuir a inércia aos elementos químicos da família 18 da tabela periódica, reforçando também a estabilidade com base somente na Regra do Octeto. Esse obstáculo epistemológico trata a inércia química nesses elementos desprezando que parte deles sejam conhecidos por realizar ligações químicas e que possuam propriedades, como a energia de ionização, que sejam consideradas na explicação do fenômeno. Como trata Bachelard (1996), pensa-se como se vê e pensa-se o que se vê. O filósofo aponta que se a poeira gruda em uma parede eletrizada, então se conclui que a eletricidade é uma cola, revelando o caráter substancialista.

Já obstáculo realista parte de um exagero das observações macroscópicas, supervalorizando as impressões visuais e concretas em detrimento do comportamento microscópico prejudicando as correlações entre eles. Por conta disso, a análise de um fenômeno e os conceitos científicos enfrentam dificuldades de compreensão Bachelard (1996).

O obstáculo animista imputa sentimentos, características e qualidades biológicas a objetos inanimados. Essa vitalidade dada a entidades inanimadas proporciona uma valorização em um sentido próximo ao mágico, pois se não houver explicação à princípio para algum

problema, basta recorrer ao princípio vital, enfraquecendo as discussões científicas. Como exemplificação, tem-se a ideia de que os elementos químicos mais eletronegativos “gostam” de elétrons Bachelard (1996).

Por fim, o obstáculo do conhecimento quantitativo parte de um exagero no uso de dados quantitativos de forma que não interfiram em um resultado. Isso sugere uma sobrecarga de informações quantitativas que podem inflar a exigência de dados a serem decorados quando os mesmos poderiam ser disponíveis a consulta, deixando à parte o que é relevante de fato: o entendimento do que é estudado e as relações a serem formuladas Bachelard (1996).

O último ponto dessa seção são as “Implicações para o ensino dos conteúdos de ensino da UDM” que descreve pontos importantes de serem evitados ou enfatizados pelo docente a partir do levantamento das concepções alternativas e da relação de obstáculos epistemológicos (Bego; Sgarbosa, 2016). Essa etapa auxilia o professor na previsão de dificuldades, podendo se antever a dúvidas persistentes e preparando-o para evitar um reforço errôneo aos conceitos durante sua exposição oral e visual (Bego; Sgarbosa, 2016).

Análise didático-pedagógica	
Concepções alternativas dos alunos sobre os conteúdos da UDM	
Obstáculos epistemológicos relacionados aos conteúdos da UDM	
Implicações para o ensino dos conteúdos de ensino da UDM	
Referências (ABNT NBR 6023)	

Quadro 3 - Terceira seção da UDM: Análise didático-pedagógica.

Fonte: Adaptado de Bego e Sgarbosa (2016).

De acordo com Bego e Sgarbosa (2016), a seção “Abordagem metodológica”, deve determinar quais serão os princípios metodológicos que orientarão a definição dos objetivos de aprendizagem, o planejamento das estratégias didáticas e de avaliação – **Quadro 4**. Conforme tratam os autores, a fundamentação metodológica está relacionada à concepção de ensino e aprendizagem do docente, pois norteará como será tratado o processo de ensino e aprendizagem. Os princípios teórico-metodológicos que serão utilizados na abordagem direcionam a prática da UDM junto às estratégias didáticas propostas na unidade didática.

Abordagem metodológica	
Princípios teórico-metodológicos da abordagem escolhida	
Referências (ABNT NBR 2023)	

Quadro 4 - Quarta seção da UDM: Abordagem metodológica.

Fonte: Adaptado de Bego e Sgarbosa (2016).

Na seção “Título, Objetivos de Aprendizagem e Sequência didática” é apresentado o título da UDM junto aos objetivos previstos nas orientações curriculares para aquele tema. Além disso, é nessa seção que o objetivo geral da UDM é explicitado. Para a definição desse objetivo, o docente deve levar em consideração o contexto da unidade de ensino em que trabalha, a análise científico-epistemológica, a análise didático-pedagógica e a abordagem metodológica. A formulação desse objetivo reflete as intenções do professor para com os alunos guiado por todo o levantamento praticado nas seções anteriores. Para atender ao objetivo geral da UDM, o docente ainda deverá selecionar as estratégias didáticas e as atividades avaliativas que acompanharão cada conjunto de aulas que atuará. Cabe lembrar que cada um desses conjuntos de aula, ou seja, cada sequência didática terá o seu próprio objetivo que também deve ser coerente com as concepções de ensino e aprendizagem e de Natureza da Ciência previamente estabelecidos (Bego; Sgarbosa, 2016). Ao definir os objetivos das sequências didáticas, o professor pode descrever qual será o conteúdo programático de cada sequência e o tempo estimado para o cumprimento desse conteúdo. O **Quadro 5** representa esse campo da UDM.

Título, objetivos de aprendizagem e sequências didáticas			
Título da UDM			
Objetivos previstos em Orientações Curriculares Oficiais			
Objetivo da UDM			
Título das SD	Objetivo das SD	Conteúdo programático das SD	Tempo aproximado (em aulas)

Quadro 5 - Quinta seção da UDM: Título, objetivos de aprendizagem e sequências didáticas.

Fonte: Adaptado de Bego e Sgarbosa (2016).

A seção da UDM intitulada “Seleção das estratégias didáticas e das estratégias de avaliação” aborda quais serão as estratégias didáticas para os conteúdos de ensino selecionados, o tempo previsto para execução das atividades que deverão ser descritas nessa seção, os recursos didáticos a serem usados e os instrumentos de avaliação que o professor adotará para cada sequência didática, conforme o **Quadro 6**. É importante considerar que a avaliação deve ser condizente com o conteúdo e os objetivos de cada SD, podendo assumir de acordo com o perfil do professor uma postura formativa ou somativa. De acordo com Bego e Sgarbosa (2016), a sequência de atividades, a seleção de estratégias e de instrumentos de avaliação deve ser permeada pela abordagem metodológica (Bego; Sgarbosa, 2016). Podem ser adotadas diferentes estratégias didáticas pois, o uso de diferentes estratégias de ensino se deve ao reconhecimento de quem os alunos não são todos iguais e não aprendem da mesma forma em tempos iguais, influenciando, inclusive, na escolha dos instrumentos de avaliação dando-lhes um caráter diversificado (Bego; Sgarbosa, 2016).

Seleção das estratégias didáticas e das estratégias de avaliação					
Título da SD					
Objetivos da SD					
Estratégia de avaliação					
Dia/aula	Estratégia didática	Conteúdo de ensino	Tempo / descrição das atividades e organização da sala de aula	Recursos didáticos	Materiais de aprendizagem/ Instrumentos de avaliação
Referências (ABNT NBR 2023)					

Quadro 6 – Últimas tarefas da UDM: Seleção das estratégias didáticas e das estratégias de avaliação.

Fonte: Adaptado de Bego e Sgarbosa (2016).

Tomando como base as considerações apresentadas no que tange o planejamento didático na prática docente, este trabalho propõe a elaboração e a aplicação de uma UDM com foco na Teoria do Orbital Molecular (TOM) como forma de valorizar seus significados e seu desenvolvimento por meio de atividades sequenciadas e estruturadas. Tal UDM direciona-se a um curso de graduação em Bacharelado em Química, podendo ser trabalhada em momento oportuno da disciplina de Química Geral para o 1º ano. Dessa maneira, espera-se alcançar a compreensão dos estudantes com a interpretação da ligação química por meio desse modelo científico. Devido ao desenvolvimento da TOM e ao plano de ensino da disciplina, deseja-se fornecer através do conjunto de sequências didáticas uma exposição da TOM como um modelo científico de ligação química de modo que as informações sejam organizadas para que haja uma clara e compreensível relação das diferenças desse modelo com a TLV.

A elaboração da UDM pretende fornecer um modo de abordagem sobre a TOM por meio da metodologia de ensino do Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) junto a estratégias didáticas variadas. Os modelos expressos pelos estudantes quanto as atividades de modelagem serão interpretadas por meio da Análise de Conteúdo de Laurence Bardin, constituindo uma fonte de informações quanto aos avanços e desafios acerca da aprendizagem da TOM por intermédio do EFM. Essa análise visa conhecer como o ensino da TOM por meio

de uma UDM fundada em modelagem pode contribuir com a aprendizagem da teoria e dos aspectos relacionados. Os modelos serão expressos pelos alunos em modo verbal que abarca a maneira oral e/ou escrita. Neste caso, serão explorados os modelos expressos de maneira escrita. Tanto as atividades de modelagem quanto as demais serão apresentadas ao longo da seção de “Resultados” e “Apêndice”. A aplicação da UDM foi realizada pela pós-graduanda junto a 58 alunos do 1º ano do curso de Bacharelado em Química do Instituto de Química da Unesp de Araraquara sob supervisão do orientador que também é professor da disciplina de Química Geral. A pesquisa possui aprovação em órgão competente - Conselho de Ética.

A cada aplicação de um momento da UDM serão redigidas anotações como um diário de aula. Essas anotações retratam, de certo modo, as impressões da pesquisadora em relação a aplicação da UDM em sala de aula promovendo reflexões gerais sob a concretização desse processo. Registros gerais desses diários serão compartilhados resumidamente nos “Resultados”.

Por fim, a primeira e a última versão da UDM serão comparadas mediante a propositura de Moralles (2021) acerca de um instrumento para análise. Esse instrumento abrange a interrelação entre os elementos do planejamento didático-pedagógico e considera a abordagem metodológico como eixo primordial da execução coerente de uma UDM.

5.2 Considerações sobre os modelos e o Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM)

A elaboração dos modelos exprime um ponto relevante, segundo Justi (2015): o modelo não parte da natureza, sendo fruto da construção humana e, conseqüentemente, é diferente da realidade. Por conseguinte, os modelos são modificados quando o conhecimento sobre a realidade é alterado, as explicações e previsões se mostram inadequadas ou ainda quando novas maneiras de representação são disponibilizadas (Justi, 2015). A autora informa que os objetivos de um modelo estão conectados a entidade a ser modelada e ao público de interesse Justi (2015).

Segundo Justi (2015), os objetivos centrais vinculados a produção de um modelo para a Química são:

- a simplificação de entidades complexas;
- a melhora na comunicação de ideias e na visualização de entidades abstratas;
- a fundamentação a proposição e interpretação de experimentos sobre a realidade;
- atuar como mediador entre a realidade modelada e as teorias, fundamentando a elaboração de explicações e previsões (Vosniadou, 2002; Justi, 2015).

Esses objetivos denotam um encargo concedido pelos modelos ao Ensino de Ciências (Justi; Gilbert, 2002). Para aprender Ciências é preciso entender a natureza e a abrangência e limitação de um modelo científico. Para aprender sobre Ciências os estudantes devem avaliar a responsabilidade dos modelos no desenvolvimento e na divulgação de resultados de uma investigação científica. E, para aprender a fazer Ciência, é necessário ser capaz de criar, expressar e testar os modelos (Justi; Gilbert, 2002).

A estruturação de um modelo se baseia na modelagem (Justi; Gilbert, 2002). O Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) tem como intuito amparar a aprendizagem a partir de um engajamento ativo dos participantes por meio do papel exercido pelos modelos no delinear da composição do conhecimento científico. Nesse processo de edificação dos modelos há dinamismo, pois não existem regras fixas para tal. Todavia, Justi (2015) propõe 4 etapas para o processo de modelar: elaboração, expressão, teste e identificação de abrangências e limitações conforme a **Figura 44**.

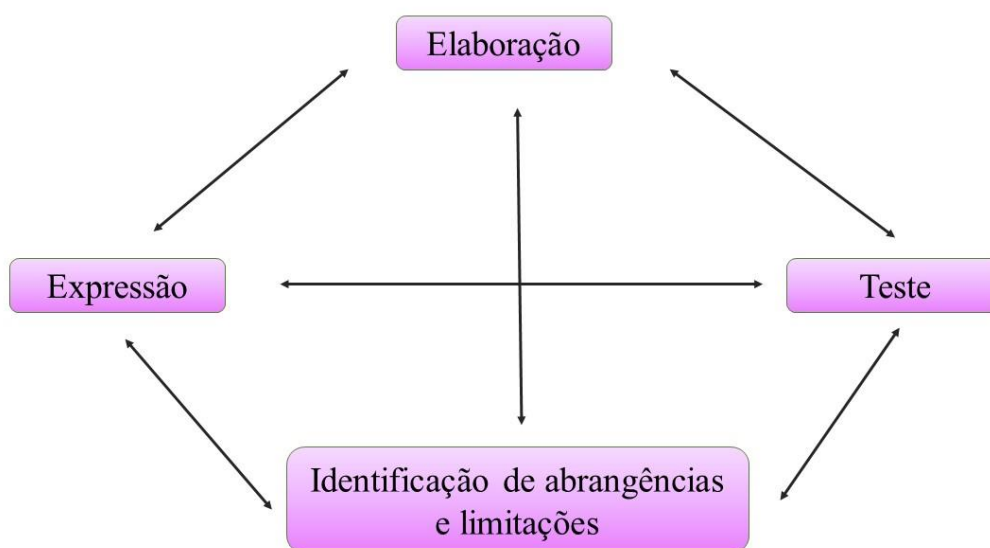


Figura 44 - Esquematização de relações entre as etapas da modelagem.

Fonte: Adaptado de Justi (2015, p. 223).

Essas quatro etapas principais propostas por Justi (2015) conduzem o processo de modelagem de maneira sugestiva. A elaboração de um modelo ocorre, a princípio, na mente, ou seja, há um modelo mental a ser produzido por um indivíduo. Para que esse indivíduo construa esse modelo, ele necessita de informações sobre a entidade, o processo, a ideia a ser

modelada. Essa instrução parte dos objetivos envolvidos com o modelo, os quais são, geralmente, projetados pelo docente responsável por apresentá-los à sala. Além disso, há informações a serem disponibilizadas sobre o que será modelado. As fontes dessas informações prévias podem ser pesquisas, experimentos, entrevistas ou quaisquer materiais advindos junto à atividade. Finalmente, possíveis analogias podem auxiliar a integrar essas cognições na proposição do modelo (Justi, 2015).

Após a elaboração do modelo mental, esse deve ser apresentado aos pares, constituindo a segunda etapa sugerida por Justi (2015): a de expressão. Essa apresentação é dada de diferentes formas que são conhecidas como meios de representação (Justi, 2015). Os meios de representação são do tipo concreto, verbal, matemático, visual ou gestual como discorre Justi (2015).

O modo concreto recorre ao uso de materiais para a produção de uma representação tridimensional. Esses materiais podem ser metálicos, plásticos, de madeira, entre outros. O modo verbal é caracterização pela descrição do modelo e de relações feitas durante o processo da modelagem, podendo ser usadas metáforas e analogias no discurso. Há também a versão escrita. O modo matemático emprega as expressões matemáticas, como as equações e funções. O modo visual recorre a ilustração bidimensional mediante gráficos, tabelas, diagramas, fluxogramas e animações. O modo gestual compõe os gestos corporais (Justi, 2015).

A terceira etapa compreende os testes dos modelos. Esses testes dependem da entidade modelada e dos recursos acessíveis para concretização sendo, portanto, uma parte que pode ser feita de modo empírico ou mental (Justi, 2015).

A última etapa de identificação de abrangências e limitações aponta para os contrastes e questionamentos do modelo apresentado, fornecendo conclusões no tocante ao propósito de utilização desse modelo em outros contextos (Justi, 2015). Essa etapa é de socialização, sendo relevante para a reflexão de possibilidades e reflexões do processo.

Compreendendo as teorias de Ligação de Valência e Orbital Molecular como modelos de ligação química, o presente trabalho sugere o uso da abordagem metodológica do Ensino Fundamentado em Modelagem para trabalhar as diferenciações entre esses modelos. Dessa maneira, espera-se contribuir para um amplo entendimento da TOM como modelo de ligação química, valorizando o processo da modelagem junto ao movimento dos alunos e a percepção de características tão particulares da teoria.

5.3 Natureza da pesquisa

A pesquisa apresenta caráter qualitativo, não podendo ser definida de forma singular, pois a pesquisa qualitativa envolve situações que permeiam a vida real dos sujeitos participantes (Yin, 2016). O termo “pesquisa qualitativa” foi utilizado, durante muito tempo, como opção alternativa à pesquisa quantitativa que passou por um período de críticas ao longo das décadas de 1960 e 1970. A pesquisa qualitativa se relaciona com diversos conteúdos e enfoques, dentre eles os de Ciências Sociais, Educação, Psicologia e afins, utilizando o texto como material empírico e partindo do contexto social em que a pesquisa está inserida. Desse modo, a pesquisa qualitativa parte da realidade, dos participantes e de suas ações e no conhecimento cotidiano relativo à questão em estudo (Brandão; Rodrigues, 2007).

Os autores Denzin e Lincoln (2006) definiram que a pesquisa qualitativa se aproxima da observação e interpretação. Consequentemente, a pesquisa abrange um conjunto de práticas interpretativas e materiais que transformam o mundo e fazem dele várias representações por meio de entrevistas, fotografias, anotações, entre outros. Além disso, os autores explicam que essa pesquisa assume uma postura naturalística ao estudar as situações em seus contextos naturais (Denzin; Lincoln, 2006).

Segundo Yin (2016), há um movimento de ação junto a situações reais com sujeitos com discursos e opiniões que caracterizam a pesquisa qualitativa como algo abrangente de todo um contexto. Por se tratar de uma pesquisa com um conjunto de características que permeiam um contexto social, é importante considerar o ambiente de vivência, as falas e as ideias dos participantes (Yin, 2016).

5.3.1 Desenho de pesquisa

O trabalho adotou a pesquisa participativa como desenho de pesquisa. A pesquisa participativa possui alguns sinônimos de acordo com o referencial adotado como, por exemplo, “pesquisa participante” e “investigação ação participativa”, entre outros (Brandão; Rodrigues, 2007). A pesquisa participativa pode ser interpretada como uma pesquisa voltada a necessidades dos indivíduos de maneira que os agentes participantes criem e recriem saberes. Logo, há a intenção de incentivo a um desenvolvimento e uma postura ativa na aprendizagem. Segundo Brandão e Rodrigues (2007), a pesquisa participativa possui vínculo com movimentos sociais, entretanto não há um único modelo ou metodologia científica própria a todas as possibilidades da pesquisa.

O desenvolvimento da pesquisa partiu da intencionalidade de se realizar uma intervenção educativa junto a turma do 1º ano de Bacharelado em Química do Instituto de Química da UNESP de Araraquara com o tema da Teoria do Orbital Molecular (TOM). A organização da pesquisa foi feita através da Unidade Didática Multiestratégica (UDM) que, a partir da sua composição, permitiu uma estruturação clara e objetiva. Ao longo das seções foram descritos os passos necessários ao alcance de uma intervenção educativa coerente e apoiada no Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) como metodologia de Ensino. Através do EFM, os estudantes puderam criar e manifestar modelos, vivenciando etapas de modelagem características dos procedimentos científicos. Por conseguinte, as aulas assumem um aspecto dinâmico e os discentes experenciam o aprender a fazer Ciência, ampliando também o conhecimento acerca dos modelos científicos. A primeira atividade consistiu em uma introdução ao assunto sobre modelos e modelagem, sendo concebida por meio de uma caixa misteriosa. As atividades de modelagem em relação a TOM foram feitas em equipes com 4 ou 5 estudantes, sendo que os alunos formavam os grupos entre si segundo suas afinidades. A primeira atividade de modelagem direcionada a TOM consiste na suposta existência das moléculas di-hidrogênio e di-hélio, sendo trabalhada por 11 grupos. Já a segunda atividade trata sobre o paramagnetismo e diamagnetismo das moléculas diatômicas homonucleares, sendo realizada por 9 grupos, pois no dia dessa aula houve a ausência de alguns alunos devido a fortes chuvas na cidade.

O resultado de todo o processo de planejamento leva a elaboração da UDM apresentada em sua última versão na seção Apêndice.

5.4 Análise de conteúdo

Ao final das atividades de modelagem, a pesquisa observou as mensagens trazidas pelos estudantes nos modelos criados por eles. Para tanto, foi utilizado a análise de conteúdo de Laurence Bardin.

A análise de conteúdo é definida como uma metodologia de pesquisa a ser usada para a descrição e interpretação do conteúdo de todo tipo de texto e documento (Moraes, 1999). Materiais originários da comunicação verbal ou não-verbal compõem o amplo acervo que pode ser estudado pela análise de conteúdo como livros, jornais, cartas, filmes, diários, fotografias, entre outros. Tal metodologia faz uso de descrições sistemáticas, qualitativas e quantitativas na busca por reinterpretar mensagens e compreender significados subjacentes (Moraes, 1999). Segundo Olabuenaga e Ispizúa (1989), a análise de conteúdo busca captar o sentido simbólico

presente nas mensagens que nem sempre são manifestadas de forma clara pelo emissor. Pelos autores, vários significados podem surgir em um texto de maneira que: autor e receptor podem perceber igualmente o sentido trazido na obra ou o sentido da mensagem é diferente para cada leitor e até mesmo a publicação pode manifestar um sentido do qual o próprio compositor não esteja consciente. A investigação do conteúdo pode ser feita através de uma perspectiva voltada as palavras, orações e letras revelando também inclinações políticas, sociais e psiquiátricas (Krippendorff, 1990).

De forma concomitante, Bardin (2016), ressalta a intenção da análise de conteúdo. A autora discorre sobre a análise de conteúdo e a linguística em sua obra diferenciando-as, mesmo que ambas apresentem o mesmo objeto, no caso, a linguagem. Para Bardin (2016), a linguística estuda a língua teórica se aprofundando em aspectos de funcionamento (as regras) e distribuição. Enquanto isso, a análise de conteúdo prioriza a mensagem de um emissor, levando em consideração as significações (conteúdo), priorizando a busca de realidades.

De origem positivista, a abordagem principal da análise de conteúdo é quantitativa, mas isso não impede sua aplicação em pesquisas com viés qualitativo ou quantitativo-qualitativo. No enfoque qualitativo ou construtivo, a intuição e a indução são usadas para alcançar a compreensão das mensagens investigadas (Moraes, 1999). A exploração do material a ser analisado leva a interpretação que, conforme Moraes (1999), possui duas vertentes. Uma delas se ajusta melhor com pesquisas de viés quantitativo em que a interpretação é realizada por meio da investigação dos significados presentes das categorias de análise em um contraste com uma fundamentação teórica a priori. Já na pesquisa qualitativa a teoria emerge da análise, assim há um movimento de interpretação e compreensão a fim de se atingir maior profundidade (Moraes, 1999). Devido ao caráter interpretativo que dá a abordagem construtiva a compreensão dos fenômenos investigados, os objetivos são refinados ao longo do processo de descrição das categorias. Dessa maneira, o delineamento da pesquisa orienta o trabalho e a partir dos dados há a construção das categorias. A construção das categorias é feita por meio da leitura e da criatividade, atendendo aos objetivos pré-estabelecidos.

E como proceder?

O método da análise de conteúdo contém as etapas: pré-análise, exploração do material e tratamento dos resultados obtidos e interpretação.

A pré-análise é a fase de organização e desenvolvimento do trabalho (Bardin, 2016). Nessa fase há três pontos principais: a escolha dos documentos a serem analisados, a elaboração das hipóteses e dos objetivos e a formulação de indicadores que auxiliem a interpretação. Os

três pontos se relacionam entre si, mas não seguem uma ordem cronológica obrigatoriamente (Bardin, 2016).

Escolha dos documentos

Segundo Bardin (2016), um primeiro contato com os documentos conduzindo às primeiras impressões é chamado de leitura flutuante. Tais documentos são selecionados constituindo um conjunto ou *corpus*. O *corpus* deve obedecer a alguns critérios, sendo esses: a exaustividade, a representatividade, a homogeneidade e a pertinência.

A exaustividade consiste em considerar todos os elementos do *corpus*, ou seja, a partir do estabelecimento dos objetivos e da seleção de documentos, não se deve excluir um elemento. Assim, caso o *corpus* consista nas entrevistas de um inquérito por exemplo, não se pode excluir uma dessas por motivos infundados.

A representatividade cabe em materiais que a análise pode ser feita por meio de uma amostragem representativa daquele universo. A homogeneidade consiste na singularidade que os documentos escolhidos devem apresentar, assim deve haver homogeneidade na seleção. Tomando como exemplo as entrevistas do inquérito para que haja homogeneidade no processo as entrevistas devem ser feitas por técnicas e pessoas semelhantes. Caso a entrevista seja feita com somente um indivíduo, gerando um documento único, não há sentido em falar da homogeneidade (Bardin, 2016). A pertinência corresponde ao quanto os materiais devem ser coerentes com os objetivos propostos.

Objetivos e hipótese

Na pesquisa qualitativa, os objetivos podem ser refinados durante a análise do conteúdo, já que a intenção é a compreensão de fenômenos. As hipóteses, que em uma pesquisa quantitativa devem ser estabelecidas desde o início, não é obrigatória na qualitativa dispensando os testes.

Formulação de indicadores

A referenciação dos índices diz respeito a se considerar o texto uma manifestação que contém índices que a análise explicitará, o trabalho preparatório será o da escolha destes e organização em indicadores. Assim, um índice pode ser um tema presente em uma mensagem,

as pausas que sugiram emoções durante uma entrevista, entre outros. Uma vez escolhidos os índices, procede-se à construção de indicadores. Disto, dá-se sequência para a exploração do material, fase que consiste em um aprofundamento da leitura em busca das unidades de análise, ou seja, de mensagens que vão ao encontro do atendimento dos objetivos propostos para que haja a construção das categorias. Desde a pré-análise devem ser determinadas operações de recorte do texto em unidades comparáveis de categorização para análise temática e de modalidade de codificação para o registro dos dados e a codificação fornece um caminho para esse processo.

Exploração do material

A codificação consiste, segundo Bardin (2016), em um processo de transformação dos dados brutos em unidades por meio da sistematização e agregação que possibilitam uma boa descrição das características do conteúdo. Sendo a codificação uma transformação dos dados brutos de uma mensagem a fim de atingir uma representação do conteúdo, é necessário então de uma organização desse processo que segue: escolha das unidades (unidades de registro e contexto), enumeração e classificação e agregação: escolha das categorias.

Há uma seleção das unidades de registro como um dos passos da codificação: seleção e agrupamento dos recortes que serão analisados. Os agrupamentos respondem de forma coerente aos objetivos. A unidade de registro consiste em um segmento de conteúdo considerado unidade base. É na seleção de unidades de registro que começam a surgir as categorias de análise na abordagem qualitativa e a contagem de frequência. Como descreve Bardin (2016), a unidade de registro pode ter dimensões variáveis, podendo ser uma palavra, um tema, uma frase, um personagem, um acontecimento ou um documento. As unidades de registro se localizam em unidades de contexto que se caracterizam por servir como uma unidade de compreensão para codificação da unidade de registro. Desse modo, as unidades de contexto tratam do ambiente em que está inserida a unidade de registro, assim uma palavra dada como unidade de registro pode estar em uma frase lida como unidade de contexto.

A seleção das regras de contagem, conhecida como enumeração, traz o modo de computação das unidades de registro presentes na análise, como também pode indicar evidências sobre aquelas ausentes. Dentre os modos de enumeração estão a frequência, a frequência ponderada, a direção, a ordem e a coocorrência.

Supondo que *a*, *d*, *a*, *e*, *a*, *b* sejam unidades de registro. As unidades presentes podem ser significativas, assim como as ausentes “*c*” e “*f*” podem expressar um sentido de bloqueio,

incertezas ou de algo a ser escondido. A frequência é uma espécie de contagem comum na enumeração. A periodicidade com que há o aparecimento das unidades é visto como significativo e, de certo modo, exprime que esses elementos tenham o mesmo valor o que pode falso. Quando se deseja dar ênfase em alguma das unidades, atribuindo um maior valor, há o uso da frequência ponderada em que os pesos conferem quantitativamente a importância. A ponderação pode ser pré-determinada, como também pode refletir a intensidade de um elemento ao final da análise. A ponderação da frequência revela um aspecto quantitativo (intensidade) ou qualitativo, no caso, a direção. A direção se manifesta por polos direcionais em que se manifestam direções favoráveis, neutras ou desfavoráveis. Aliada a intensidade, a direção pode ser representada por escalas. Assumindo uma reta em direção horizontal, uma de suas extremidades reflete a intensidade negativa enquanto a outra traduz a intensidade positiva a partir de uma mediana (Bardin, 2016).

A ordem de aparição das unidades de registro pode ser enumerada caso reflita a pertinência do elemento analisado (Bardin, 2016). Logo, a ordem da posição de um elemento *a* em relação a um elemento *b* é de interesse do pesquisador e transparece que a sucessão de um termo ou outro possui um significado relevante. O ordenamento e a frequência das unidades de registro podem ser combinados para futura interpretação.

A coocorrência é a presença simultânea de duas ou mais unidades de registro em uma unidade de contexto, segundo Bardin (2016). A medida de coocorrência (análise de contingência) atua sobre a distribuição dos elementos e a associação. A distribuição é um ponto que pode ser muito significativo no texto, pois os elementos podem ser dispersos ou concentrados em uma mensagem. O uso da associação como um indicador condiz com a ideia de que os elementos associados numa manifestação da linguagem estão associados com o espírito do locutor ou do destinatário. As modalidades qualitativas que, ocasionalmente, podem diferenciar a natureza da coocorrência são:

- Associação: um elemento *a* aparece com o elemento *b*;
- Equivalência: o elemento *a* ou o elemento *d* aparecem em um contexto idêntico, o que induz a observação de um caráter de equivalência ou de substituição;
- Oposição: ocorre quando um elemento *a* nunca aparece com o elemento *c*.

A categorização, última etapa da codificação, consiste no agrupamento de classes ou unidades de registros sob um título genérico: uma “etiqueta” (Bardin, 2016). De acordo com Bardin (2016), a categorização é uma operação de classificação de elementos constitutivos de um conjunto por diferenciação para que sejam, posteriormente, reagrupados a partir de critérios definidos, entretanto, essa não é uma etapa obrigatória de toda e qualquer análise de conteúdo.

A criação das “etiquetas” deve observar critérios semelhantes aos de seleção do *corpus*: exclusão mútua, homogeneidade, pertinência, objetividade, fidedignidade e produtividade.

O critério de categorização pode ser semântico, sintático, léxico e expressivo.

- Semântico: é o estudo do sentido das unidades linguísticas, levando ao significado. Por exemplo, na observação de categorias temáticas associadas a ansiedade todos os temas que significam a ansiedade ficam agrupados na categoria “ansiedade”, enquanto os que significam a descontração ficam agrupados em “descontração”;
- Sintático: faz referência ao estudo dos elementos que incorporam uma frase, como os verbos e adjetivos.
- Léxico: classificação das palavras através do seu sentido, com emparelhamento dos sinônimos e sentidos próximos;
- Expressivo: categorias que classificam as diversas perturbações da linguagem.

Descrição e interpretação

A descrição é o primeiro momento de comunicação do pesquisador na divulgação do trabalho. No caso da pesquisa construtiva, a descrição é um processo de elaboração de um texto explicativo das situações que contextualizam os recortes selecionados e a apresentação desses. Logo, colabora no entendimento do meio em que se encontram os materiais de análise, possibilitando conhecer, de certa forma, os interlocutores. Tal parte é importante para a interpretação que é tão fundamental em pesquisas de viés qualitativo. Assim, a realização de pequenos textos-sínteses que expressem a compreensão do fenômeno e o levantamento de textos científicos que ajudem o pesquisador na interpretação dos dados são importantes nessa etapa final.

Conforme explica Bardin (2016), a intenção da análise de conteúdo é a inferência de conhecimentos relativos de condições de produção e/ou recepção. A inferência pode responder, consequentemente, os antecedentes de uma mensagem ou as consequências a serem provocadas por ela. Não se trata apenas de compreender significados, mas ir além desses atingindo através deles, como aqueles de natureza histórica, política, psicológica e sociológica.

Bardin (2016) faz a seguinte aproximação “o analista é como um arqueólogo”, isso porque, segundo a autora, as manifestações de dados, estados e fenômenos são vestígios que podem ser manipulados para inferir interpretações sobre o emissor e/ou receptor da mensagem ou sobre o seu meio. A autora exemplifica a análise dos caixotes de lixo, os quais, permitem inferir sobre a condição socioeconômica dos moradores de um bairro, os hábitos de consumo e

o desperdício de alimentos. Tal análise pode ser feita ainda de forma comparativa ao longo do tempo, indicando de forma paralela a situação econômica do país como se mantém a realidade de consumo das famílias de determinadas regiões.

A interpretação dos dados é parte relevante junto a descrição. Ao falar sobre os conteúdos manifestos, latentes e ocultos, encontra-se intenções, sentimentos, opiniões e vontades nem sempre claramente expostos. O conteúdo manifesto é àquele expresso pelo autor enquanto o latente se aproxima daquilo que se quis dizer, dando um caráter de um assunto oculto consciente. Já o oculto trata do conteúdo inconsciente. Assim, a interpretação que é fortemente vinculada a pesquisa de cunho qualitativo, direciona a compreensão da relação entre o conteúdo manifesto, latente e oculto (Bardin, 2016).

6 RESULTADOS

Levando em consideração que um dos objetivos deste trabalho consiste em analisar as contribuições de uma Unidade Didática Multiestratégica (UDM) baseada no Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) para abordagem da Teoria do Orbital Molecular (TOM) junto a alunos do Bacharelado em Química foi elaborada e aplicada uma UDM a ser apresentada nesta seção. A estruturação da UDM seguiu as orientações de Bego e Sgarbosa (2016) que a dividem em seções conforme exposto no percurso metodológico. A UDM trouxe uma sequência de atividades planejadas com a intencionalidade de tratar de maneira coerente o tema proposto a partir da escolha do Ensino Fundamentado em Modelagem como metodologia de Ensino. Isto posto, modelos serão arquitetados pelos estudantes que deverão expressá-los em papel. Esses modelos serão estudados por meio da análise de conteúdo de Bardin (2016) a fim de que se possa interpretar a compreensão e as dificuldades dos estudantes a partir desta proposta de abordagem da TOM. As atividades serão descritas e apresentadas ao longo deste trabalho.

Além disso, há o objetivo de correlacionar a posição em energia das configurações de valência dos átomos representativos, principalmente, do primeiro e segundo períodos da tabela periódica com os diagramas de orbitais moleculares estabelecidos por estes átomos em moléculas diatômicas homo e heteronucleares tornando possível encontrar uma proposta clara para a inversão sigma (σ) – pi (π). Sabe-se que essa inversão dos orbitais moleculares pode ser explicada por meio do modelo da hibridização, como também pela relação da carga nuclear efetiva junto ao aumento do número atômico e se pretende enriquecer essa análise através de um modelo que usufrua da energia orbital usada por Allen (1989) e Allen, Mann e Meck (2000) na descrição da eletronegatividade, permitindo ampliar a compreensão desse fenômeno nos diagramas de orbitais moleculares. Ademais, os diagramas de orbitais moleculares trazem informações relevantes sobre as moléculas como a ordem de ligação e a quantidade de elétrons desemparelhados. Baseado nessas informações e em correlações adjacentes ao átomo isolado, foram descritos modelos para a energia de dissociação de moléculas diatômicas do primeiro e segundo períodos da tabela periódica. Esses modelos não foram aplicados junto aos alunos do curso de Bacharelado em Química por conta da complexidade das informações a nível de uma turma de primeiro ano. Embora, não tenham sido aplicados, entende-se que essa análise possibilita novas discussões acerca dos diagramas de orbitais moleculares. Essa parte da obra foi idealizada por pesquisadora e orientador a partir dos dados experimentais da energia de dissociação de moléculas e da energia orbital junto a correlações que serão amplamente exploradas em momento oportuno.

Logo, o trabalho como um todo pretende trazer uma proposta educacional ao Ensino da TOM para o público do Ensino Superior e, em paralelo, busca valorizar as informações vinculadas a teoria e ao átomo isolado na interpretação de dados de energia de dissociação de moléculas diatômicas homonucleares e no estudo da inversão sigma (σ) – pi (π).

Assim, os resultados da pesquisa serão divididos em duas partes:

Parte I: Elaboração e aplicação da UDM “Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas” em que serão apresentadas as atividades de modelagem junto aos modelos e ideias dos alunos, como também as categorias criadas a partir dessas respostas por meio da análise de conteúdo de Bardin (2016). Por fim, há uma comparação entre o início da criação da UDM à sua última versão revelando avanços significativos no processo de construção do material como também da formação dos pesquisadores. As outras atividades propostas ao longo da aplicação da UDM encontram-se na seção Apêndice. Essas atividades envolvem equipes para solução de exercícios projetados para um amplo alcance de comparação dos modelos científicos de ligação química (TOM e TLV), além de produção individual de linha do tempo sobre o desenvolvimento histórico da TOM.

Parte II: Análise da variação da energia de dissociação de ligação de moléculas diatômicas homonucleares de elementos químicos do primeiro e segundo período da tabela periódica em relação ao número atômico considerando propriedades do átomo isolado fornecendo interpretações dessas características correlacionadas com modelos expressos em modo matemático e visual. A leitura da energia de dissociação de ligação dessas moléculas junto a propriedades dos átomos dialoga com os diagramas de orbitais moleculares. Finalmente, foi proposta uma sugestão de explicação do comportamento de inversão $\sigma - \pi$ em moléculas diatômicas homonucleares do segundo período da tabela periódica a ser explicitado por representação gráfica e equacional apoiado nos estudos de Leland Allen (1989) e Leland Allen, Joseph Mann e Terry Meek (2000).

6.1 Parte I

6.1.1 Elaboração e aplicação da Unidade Didática Multiestratégica (UDM)

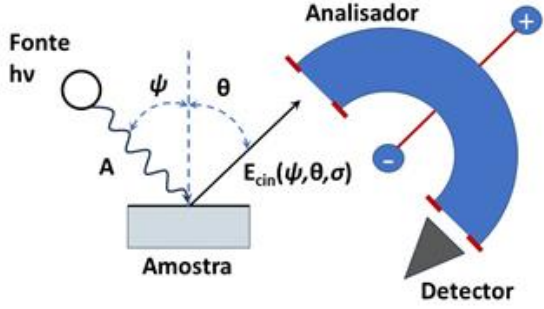
A Unidade Didática Multiestratégica (UDM) intitulada “Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas.” é apresentada de forma completa e contínua na seção Apêndice devido a organização deste trabalho, sendo destacados neste capítulo alguns pontos importantes dessa sequência para melhor compreensão do leitor e discussão dos resultados.

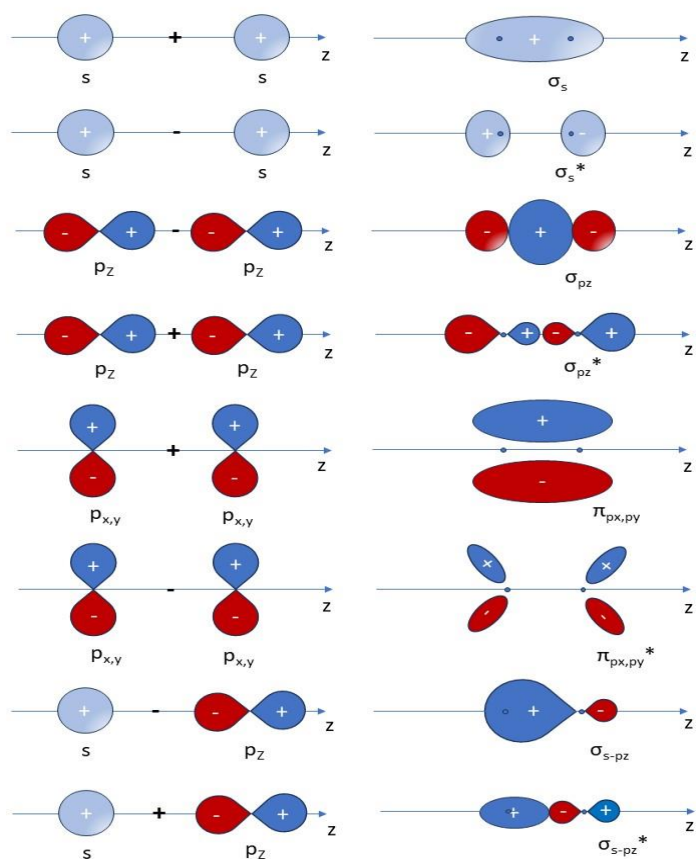
A UDM foi organizada a partir de sete seções conforme descrito no “Percurso metodológico”. Na primeira seção “Contexto da intervenção didático-pedagógica” ocorreu a caracterização do ambiente escolar e do perfil dos estudantes através de um formulário *on-line* disponibilizado via *Google*. Essa caracterização permitiu conhecer que a ampla maioria dos estudantes do Bacharelado possuem entre 18 e 19 anos, sendo todos da região Sudeste. Há o predomínio quantitativo de indivíduos autodeclarados brancos (82,7%) seguidos por pessoas pardas (9,6%). Uma parcela majoritária (94,2%) não precisa trabalhar para se manter em Araraquara e, aproximadamente, 57% desses alunos estudaram em escolas particulares na educação básica. Quando questionados sobre como moram em Araraquara houve predomínio daqueles que moram com amigos (48,1%). Em relação a possuírem um ambiente adequado de estudos em suas residências descobriu-se que 13,5% dessas pessoas não tem essa disponibilidade.

Além da caracterização dos estudantes, foi feita uma breve descrição do ambiente de aplicação da UDM; o Instituto de Química da UNESP de Araraquara. O conhecimento desses dados permite uma elaboração consciente da UDM quanto ao contexto social e aos recursos disponíveis, colaborando no próprio planejamento docente. Todas essas informações e os modelos gráficos representativos desses dados se encontram na seção Apêndice para descrição da UDM. Ressalta-se que além da caracterização por meio do formulário, a pesquisadora pôde acompanhar os estudantes ao longo de toda a disciplina, conhecendo algumas histórias e construindo um convívio harmônico ao longo do semestre.

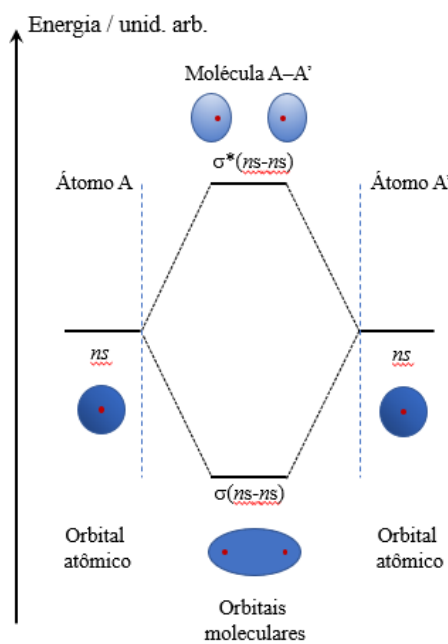
A segunda seção, “Análise Científico Epistemológica”, trouxe as orientações curriculares acerca do tema com base no Parecer CNE/CES 1.303/2001, de 4 de dezembro de 2001, como também apontou conteúdos que são pré-requisitos para o estudo da TOM. Ademais,

foram traçados os conteúdos conceituais em aspecto teórico, fenomenológico e simbólico. Destaca-se aqui, um recorte dessa seção como consta no **Quadro 7**.

Conteúdos conceituais - Identificação dos fatos e/ou fenômenos de interesse (aspecto fenomenológico) - Interpretação dos fatos ou fenômenos de interesse (aspectos teórico e simbólico)	- Aspecto fenomenológico A espectroscopia de fotoelétrons atua como uma comprovação experimental do fenômeno da ligação química, sendo possível indicar a quantidade de energia a ser fornecida ao sistema para remoção de elétrons.  Fonte: Adaptado de Dias e Anjos (2021). - Aspecto teórico A combinação de orbitais atômicos leva à formação dos orbitais moleculares. Uma combinação que reforce o aumento da densidade eletrônica entre os núcleos atômicos pode ser entendida como um fenômeno de interferência do tipo construtivo. Já a diminuição da densidade eletrônica nessa combinação pode ser interpretada como um fenômeno de interferência destrutivo. Os orbitais moleculares são produzidos considerando as três dimensões (eixos x, y, z). Orbitais moleculares do tipo ligantes, antiligantes e não ligantes são gerados das combinações de orbitais atômicos, cada qual com suas singularidades. Pelos orbitais moleculares estão distribuídos os elétrons, assim essas entidades pertencem à molécula. Os orbitais moleculares seguem uma ordem de energia. Essa ordem de energia pode variar entre o grupo dos átomos leves que originam as moléculas diatômicas homonucleares (B₂, C₂ e N₂) e os átomos pesados que originam as seguintes moléculas (O₂, F₂ e Ne₂). Ordem de ligação, existência da molécula e força de ligação. - Aspecto representacional As representações químicas acerca da TOM são: • $\sigma = \psi 1s + \psi 1s$ • $\sigma^* = \psi 1s - \psi 1s$ • $OL = \frac{(n. \text{elétrons ligantes} - n. \text{elétrons antiligantes})}{2}$
---	---



Fonte: Adaptado de Barros (1992).



Fonte: Obra dos autores.

Quadro 7 - Recorte da seção "Análise Científico-Epistemológica" da UDM.

Fonte: Obra dos autores.

Além desses conteúdos trazidos nessa parte da UDM, destaca-se que nela também se encontra o desenvolvimento histórico da TOM e um esquema conceitual científico por meio de mapa conceitual. O desenvolvimento histórico foi projetado de modo a conectar alguns aspectos históricos relevantes dentre tantos que compõem a completude e a complexidade dos desdobramentos científicos. Destaca-se que essa abordagem objetiva um processo de ensino-aprendizagem menos fragmentado e que valorize os personagens e seus modelos científicos. O mapa conceitual acerca da TOM e as demais tratativas situam-se na seção Apêndice junto a UDM.

A terceira seção intitulada “Análise Didático-Pedagógica” teve papel fundamental em todo o processo reflexivo acerca da UDM na percepção da pesquisadora. Isso decorre do levantamento das concepções alternativas dos estudantes quanto ao tema encontrados em literatura internacional. Aliás, foram sondados os obstáculos epistemológicos relacionados ao conteúdo. A união dessas informações promoveu um cuidado na concepção das aulas, da UDM, do vídeo, das atividades e na fala em sala de aula. O **Quadro 8** mostra um recorte dessa seção evidenciando algumas concepções alternativas.

Concepções alternativas dos alunos sobre os conteúdos da UDM	Orbital atômico é um par de elétrons (Stefani; Tsarpalis, 2009).
	Orbitais moleculares são orbitais atômicos (Stefani; Tsarpalis, 2009).
	Orbital atômico como uma região do espaço em que há maior probabilidade de um elétron ser encontrado (Stefani; Tsarpalis, 2009).
	As nuvens eletrônicas correspondem a representações exatas de entidades submicroscópicas (Stefani; Tsarpalis, 2009).
	Todas as espécies querem ser como os gases nobres (atingir o octeto), afinal isso dá estabilidade (Jenkins; Shoopman, 2019).

Quadro 8 - Recorte da seção "Análise Didático-Pedagógica" da UDM.

Fonte: Obra dos autores.

Nota-se que o conceito de orbital é confuso para muitos estudantes como aponta os dados de Stefani e Tsarpalis (2009). Os autores revelam que o conceito de orbital, de orbital atômico e de orbital molecular são, frequentemente, descaracterizados de seus significados.

Além do mais, a descrição equivocada de ideias, constituindo obstáculos epistemológicos, pode provocar lacunas em correlações e interpretações como a observada “Orbital atômico como uma região do espaço em que há maior probabilidade de um elétron ser encontrado”, pois não é qualquer região do espaço associado a maior probabilidade de se encontrar um elétron, mas sim a uma região ao redor de um núcleo atômico. Caso a distância entre núcleo e elétron seja infinitamente longínqua, assume-se que não há constituição do átomo. Outra concepção vista diz respeito ao equívoco que envolve a interpretação de modelos como cópias de uma realidade exemplificado no pensamento “As nuvens eletrônicas correspondem a representações exatas de entidades submicroscópicas” trazido por Stefani e Tsarpalis (2009). Por fim, a regra do octeto alcança um *status* hegemônico para alguns indivíduos que a entendem como uma lei associada a estabilidade de todos os elementos químicos, conforme traz os autores Jenkins e Shoopman (2019) em “Todas as espécies querem ser como os gases nobres (atingir o octeto), afinal isso dá estabilidade.” Interpreta-se também um caráter animista por conta da vontade relatada das espécies químicas.

Após o contato com a literatura a fim de se apropriar das concepções registradas e dos obstáculos epistemológicos presentes em materiais de consulta, o docente pode concluir sobre os aspectos a evitar e a reforçar junto com seus alunos como bem expresso nessa seção e descrito na UDM.

A seção “Abordagem metodológica” consiste na apresentação da metodologia de Ensino vinculada ao desdobramento do tema. Como exposto anteriormente, a metodologia orientadora deste trabalho é o Ensino Fundamentado em Modelagem. Os princípios teórico-metodológicos dessa seção são descritos com mais detalhes na UDM localizada no Apêndice.

A Unidade Didática Multiestratégica (UDM) foi elaborada de modo que o **Quadro 9** resume a estruturação da UDM intitulada “Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas” de forma a apresentar o objetivo geral e a organização do conteúdo programático distribuído em um total de seis aulas. Essas aulas compõem uma sequência didática dividida em três momentos principais que são:

- i. Modelos e desenvolvimento histórico rumo a TOM;
- ii. A TOM como um modelo científico para a interpretação da ligação química;
- iii. Amplitude do uso da TOM na relação de características junto aos diagramas de orbitais moleculares.

Esses momentos são compostos por conteúdo programático condizente com os objetivos específicos que coordenam a aula.

Título da UDM	Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas		
Objetivo da UDM	Analisar a Teoria do Orbital Molecular como um modelo científico de ligação química organizando informações para sua elaboração e diferenciação da Teoria de Ligação de Valência		
Título da SD	Objetivo da SD	Conteúdo programático da SD	Tempo aproximado (em aulas)
Modelos e desenvolvimento histórico rumo a TOM	Entender o que são modelos e a importância desses no meio científico, interpretando atividades de modelagem e exemplificações. Interpretar os aspectos históricos que colaboraram para a elaboração da Teoria do Orbital Molecular, explicando as contribuições e relacionando-as. Lembrar o que são orbitais e as interferências construtivas e destrutivas desses na formulação da ligação química, reconhecendo as relações existentes entre ambos.	Modelos; Modelos na Ciência; Desenvolvimento da TOM.	2 aulas (100 minutos).
A TOM como um modelo para a interpretação da ligação química.	Interpretar a ligação química explicando a Teoria do Orbital Molecular com o auxílio da modelagem e dos diagramas para moléculas diatômicas homonucleares. Aplicar as relações de ordem de ligação e	Ligação química; Diagramas de orbital molecular para moléculas homonucleares; Ordem de ligação; Espectroscopia de fotoelétrons;	2 aulas (100 minutos).

	preenchimento de orbitais antiligantes, executando um exercício direcionado às espécies de nitrogênio.	Orbitais HOMO e LUMO.	
Amplitude do uso da TOM na relação de características junto aos diagramas de orbitais moleculares.	Analisar a TOM em exercícios de ligação química organizando os procedimentos necessários na elaboração dos diagramas junto a correlação dos orbitais HOMO/LUMO com a energia de ionização e afinidade eletrônica e a atribuição de orbitais moleculares e características magnéticas.	Paramagnetismo e diamagnetismo; Reconhecimento de fenômeno de estado excitado; Inversão sigma-pi; Diagramas de orbital molecular para moléculas heteronucleares.	2 aulas (100 minutos).

Quadro 9 - Quadro resumo da elaboração da UDM "Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas."

Primeiro momento da UDM: Modelos e desenvolvimento histórico rumo a TOM

No primeiro momento “Modelos e desenvolvimento histórico rumo a TOM” foram desenvolvidos em sala de aula os conteúdos sobre modelos, modelos na Ciência e desenvolvimento histórico da TOM. Para abordar a modelagem e propiciar a vivência de suas etapas sob a luz de se fazer Ciência, propôs-se a atividade da caixa misteriosa. Nessa atividade, os alunos deveriam descobrir o que havia dentro da caixa, sem poder abri-la e sob comandos sequenciados da pesquisadora. Esses comandos consistiam em adivinhar os objetos sem poder balançar a caixa; balançando a caixa e utilizando um ímã. A ideia de passagem desses comandos é permitir com que haja o reconhecimento de que os cientistas formulam modelos baseados nos instrumentos e técnicas disponíveis, descrevendo novas hipóteses à medida que limitações vão sendo encontradas. Essa atividade contou com participação engajada dos estudantes que vivenciaram a modelagem. Posteriormente, por meio de aula expositivo-dialogada, foram tratados sobre os modelos na Ciência reconhecendo gráficos, desenhos, gestos, tabelas, reações químicas, equações e textos.

Ainda nesse momento, o desenvolvimento histórico foi tratado de forma dialogada a partir de uma associação que deveria ser feita pela sala em relação aos desdobramentos

científicos e aos cientistas. Embora muitos alunos não tenham correlacionado às informações aos autores corretamente, teve-se participação ativa da sala e, por conseguinte, esses fatos foram explicitados no decorrer da aula. Dando seguimento a esse desenvolvimento, foram apresentadas as principais ideias de Mulliken, Lennard-Jones, Condon e Hund na formulação da TOM. Junto às contribuições de Lennard-Jones em meio a Combinação Linear dos Orbitais Atômicos (CLOA) foi exibida uma animação, através de planilha eletrônica, do encontro de duas ondas em fase e fora de fase para retratar as interferências construtivas e destrutivas, respectivamente, associadas ao caráter ondulatório do elétron.

Por fim, a pesquisadora solicitou uma atividade de construção de uma linha do tempo aos alunos a ser realizada individualmente a fim de engajar nos estudantes uma correlação própria dos acontecimentos que culminaram, direta ou indiretamente, na TOM. Junto a essa atividade, foi pedido aos alunos que descrevessem a relação de elementos como os orbitais, as interferências construtivas e destrutivas das funções de onda e a noção probabilística de um elétron na concepção das ligações químicas. As atividades mencionadas são descritas com mais detalhes no campo “Atividades” no Apêndice.

Segundo momento da UDM: A TOM como um modelo para interpretação da ligação química

Nesse momento são retomados conceitos das aulas anteriores e dado o início as atividades de modelagem com relação a TOM.

A atividade de modelagem teve início com as supostas existências das moléculas de di-hidrogênio e di-hélio. Foi solicitado que os alunos, divididos em grupos de 4 – 5 alunos segundo suas afinidades, elaborassem um modelo para explicar a existência ou não existência da molécula de hidrogênio com base nas teorias de ligação química. Após essa etapa foi pedido que os estudantes construíssem outro modelo, mas desta vez para a existência (ou não) da molécula de hélio. Essa atividade será discutida com maior profundidade adiante de modo que sejam analisados os modelos expressos pelos alunos através da análise de conteúdo de Bardin. A tratativa da ligação química por entre as teorias de ligação química foi amplamente discutida nessa etapa.

Ao final da modelagem, a continuidade da aula se deu por meio da exposição dialogada dos conteúdos: diagramas de orbitais moleculares para espécies diatômicas homonucleares; ordem de ligação; espectroscopia de fotoelétrons e orbitais HOMO e LUMO. Os diagramas das espécies H_2 a N_2 foram trabalhados nessa aula. A tratativa dos orbitais HOMO e LUMO foi

dada por meio visual através dos diagramas junto as correlações com as propriedades periódicas afinidade eletrônica e energia de ionização.

A espectroscopia de fotoelétrons foi abordada de forma participativa. Para entendimento dessa técnica, foram trazidos para discussão as representações gráficas simplificadas da espectroscopia de fotoelétrons do oxigênio e do alumínio. Essas representações serviram para que fosse visualizado o modelo gráfico fornecido pela técnica, associando a quantidade de energia a ser dispensada em benefício da retirada de elétrons mais ou menos internos em relação ao núcleo do átomo.

Finalmente, um exercício voltado a análise da estabilidade de espécies de nitrogênio foi solicitado e realizado de modo individual. O objetivo do exercício consiste na correlação da ordem de ligação com a estabilidade da ligação química de acordo com a ocupação dos orbitais moleculares por elétrons. A maior parte dos estudantes construiu o diagrama de orbitais moleculares do N_2 e das espécies derivadas como base da resposta, enquanto outros utilizaram somente a ordem de ligação e a observação da ocupação dos orbitais moleculares.

O roteiro dessas atividades encontra-se em “Atividades” no capítulo Apêndice deste trabalho.

Terceiro momento da UDM: Amplitude do uso da TOM na relação de características junto aos diagramas de orbitais moleculares

Inicialmente, partiu-se da retomada dos exercícios das espécies de nitrogênio debatendo-se sobre a ordem de ligação e a estabilidade. Em sequência foram abordados os conteúdos do paramagnetismo e diamagnetismo de moléculas, a inversão $\sigma - \pi$, os fenômenos de estado excitado e os diagramas de orbitais moleculares de espécies diatômicas heteronucleares.

O paramagnetismo e diamagnetismo de moléculas foi trabalhado por meio de atividade de modelagem a ser apresentada com maior profundidade posteriormente. Essa modelagem foi realizada em grupo, sob as mesmas orientações de formação das equipes citadas anteriormente. Após a modelagem, a pesquisadora discutiu os demais diagramas de orbitais moleculares das espécies diatômicas O_2 a Ne_2 revelando a inversão $\sigma - \pi$.

Os diagramas de orbitais moleculares de espécies diatômicas heteronucleares foram trabalhados a partir dos orbitais moleculares não ligantes através de atividade em grupo. Para essa atividade foram criados alguns exercícios com aspectos importantes trabalhados ao longo das aulas. Por meio de sorteio, cada equipe selecionou uma questão. Dessas questões, a de

número 1 foi trabalhada por somente uma equipe, enquanto as demais tiveram o envolvimento de duas equipes para cada uma das perguntas. Percebeu-se que os alunos foram desafiados por essas questões devido ao momento de reunir os diversos conceitos abordados. As equipes realizaram a atividade em papel e socializaram suas ideias com a sala, desenvolvendo a fala científica e a conexão de conceitos.

Todos esses exercícios encontram-se em “Atividades” no Apêndice.

Reflexões gerais sobre a implementação da UDM em sala de aula

O processo de implementação da UDM promoveu momentos de reflexão. A partir do registro das aulas em forma de diários, tem-se um panorama da pesquisadora frente as situações vividas em sala. A elaboração, a aplicação e a reflexão atuam como um fio condutor que liga o pesquisador ao trabalho docente planejado. Esse momento de reconhecimento colabora em possíveis modificações para interesse de reformulações na proposta.

Nesta seção serão comentados os diários de aula produzidos pela pesquisadora.

Comentários gerais acerca do Diário de Aula 1

A primeira aula foi preenchida com discussões e atividades envolvendo os modelos. De início, o professor abordou de maneira expositivo-dialogada as interpretações sobre modelos. Alguns alunos já se expunham sobre a concepção que possuíam sobre os modelos, indicando a capacidade de representação. Entretanto, foi após a primeira provocação sobre o ato de modelar com o uso da “Caixa misteriosa” que de forma majoritária houve a participação massiva dos alunos. Desafiados a desvendar o que havia na caixinha foram bastante criativos e dedicados. Inspirados no “gato de Schrödinger” suspeitaram haver algum objeto similar dentro da caixa. A interação com a caixa nos três momentos: sem balançar, com permissão para balançar e uso de ímã envolveu ativamente os alunos.

O engajamento da sala se manifestou em boas hipóteses do que poderia haver dentro da caixa. Inclusive os gostos pessoais do pesquisador foram questionados por alguns alunos. Sem dúvidas o EFM promoveu a interação entre os pares unidos sob o objetivo de desvendar a caixa misteriosa. As conclusões de cada grupo foram socializadas com toda a sala.

Como cada participante da atividade apresentou uma postura ativa e interessada na atividade, essa primeira parte ultrapassou o tempo estimado inicialmente. Além disso, a sala continha um número considerável de estudantes: 58 pessoas. Apesar da não adequação do

tempo estipulado, foi possível adequar a sequência de aulas de modo que as etapas seguintes fossem cumpridas.

Comentários gerais acerca do Diário de Aula 2

O segundo dia de aplicação da UDM começou com a retomada da discussão sobre a atividade da caixa misteriosa do dia anterior. Os alunos insistiram para saber o que de fato havia na caixa, porém isso não lhes foi revelado. Além do processo de modelagem com a caixa ter proporcionado aos participantes interações importantes no fazer Ciência, também promoveu uma maior aproximação dos atores pesquisador-estudante. Essa aproximação entre os participantes, colaboraria no desenvolvimento de outras etapas da UDM, na discussão dos modelos científicos e nas tríades I-R-F (Início-Resposta-Feedback). Após a etapa da caixa misteriosa, outros modelos foram conversados em sala por meio da exposição-dialogada.

Outro momento interativo se deu com o desafio do reconhecimento de acontecimentos científicos associados a cientistas específicos. A atividade movimentou os alunos retirando-os de uma postura que recebe a informação “cientista – fato” para o resgate desses movimentos em suas memórias. Embora parte da sala tenha participado, seja com acertos ou erros nas respostas, outros permaneceram em silêncio, indicando receio em errar. Esse momento foi importante para a condução de que a Ciência não é construída de fatos e/ou cientistas isolados. Ademais, os fatos históricos selecionados possuem alguma conexão com o desdobramento da ligação química em virtude da TOM.

Após relembrar fatos tão importante para o entendimento da ligação química, foi iniciado o momento de conhecimento dos fundadores da TOM e de suas principais contribuições, sendo eles Robert Mulliken, Friedrich Hund, Edward Condon e John Lennard-Jones. Começando por Mulliken, o docente perguntou a sala o que entendiam por orbital. As respostas recebidas trouxeram elementos da definição de Mulliken, embora o nome desse não fosse mencionado. Da definição de orbital criada pelo químico até o método da Combinação Linear dos Orbitais Atômicos (CLOA) desenvolvido por Lennard-Jones houve uma exposição dialogada. Essa parte permitiu apresentar aos alunos o relacionamento de bases importantes para a época e que até hoje são mencionadas em materiais didáticos, superando a separação do modelo científico com sua origem. Uma planilha de dados foi apresentada aos alunos, simulando interferências construtivas e destrutivas entre ondas, relacionando-as as ideias de Lennard-Jones com os orbitais ligantes e antiligantes.

Outro momento da UDM teve início com a retomada do método CLOA e em sequência foi solicitado aos alunos a modelagem acerca da existência de espécies como o di-hidrogênio e di-hélio. Novamente, a modelagem fomentou a interação entre os pares. Os grupos discutiram a primeira parte (a da espécie de di-hidrogênio) de forma quase unânime. Confiantes no modelo do octeto e na estabilidade advinda dele, os grupos confirmaram a existência do H_2 . Outros grupos utilizaram a sobreposição orbital conhecida na TLV por meio de representações gráficas da aproximação de orbitais. O professor que passou de grupo em grupo durante a modelagem percebeu que os alunos estavam seguros na construção dos modelos. Os participantes tiveram postura ativa nessa primeira etapa, discutindo entre si como apresentar essas ideias. Ressalta-se que dois grupos destoaram dos demais tentando aplicar a TOM considerando os orbitais ligantes e antiligantes.

Em sequência à primeira pergunta, o professor pediu aos alunos que propusessem um modelo para expressar se há ou não a espécie di-hélio. Várias equipes seguiram o caminho da estabilidade devido ao preenchimento completo da camada de valência $1s$. Finalizada a expressão desses modelos em papel, a aula terminou com a socialização de toda essa primeira etapa. Em geral, não houve muita distinção entre os grupos para a molécula H_2 , predominando o modelo de Lewis e da TLV. Já em relação a existência da suposta molécula He_2 , foi preponderante a concepção da não existência que coube ao papel da estabilidade da molécula como um gás nobre por conta dos oito elétrons em camada de valência. Apenas dois grupos se distanciaram dos demais ao sugerir que os orbitais antiligantes deveriam compor a aproximação dos orbitais desses átomos, esboçando um cancelamento de “elétrons ligantes e antiligantes”.

Nesse conhecimento dos modelos de cada equipe, em determinado momento da socialização, um estudante lembrou que parte dos elementos que compõem a família dos gases nobres participava de ligações químicas. A sua colocação deixou a sala, em um primeiro momento, em silêncio. Uma estudante, desconfiada dessa informação, se mostrou a favor da ideia de não ligação entre dois átomos de hélio devido a estabilidade da camada de valência. Assim como ela, outros alunos concordavam com essa concepção. Entretanto, o “incômodo” causado pela pergunta do estudante forneceu a faísca necessária para o movimento dos alunos em outras direções.

Terminada a socialização, a aula chegou ao fim. Aqui se percebeu de forma nítida que as atividades com modelagem necessitavam de tempo maior que o previsto para sua completude e que o levantamento apontado por um colega serviria de gancho para a próxima aula.

Comentários gerais acerca do Diário de Aula 3

Em continuidade a aula anterior, o professor apresentou um *slide* com os modelos expressos em forma de representação gráfica para retomar as discussões de existência das moléculas. Essa organização permitiu lembrar o que cada grupo havia tratado como mais importante através de seus esboços artísticos. Assim, toda a sala pôde reviver a socialização da aula passada. Além disso, a pergunta do colega sobre parte dos gases nobres realizarem ligações químicas foi lembrada. Questionados se manteriam os mesmos modelos, algumas equipes deram respostas afirmativas enquanto outras ficaram em silêncio.

A atividade de modelagem foi retomada. Foi bastante interessante ver os alunos discutindo entre si em cada grupo. Algumas equipes começaram a modelagem interpretando que todos os elementos da família 18 apresentavam a capacidade ou não de realizar ligações químicas, desconhecendo que essa característica é particular a parte dos elementos. Outros continuaram no caminho da estabilidade via regra do octeto, mantendo seus modelos. Já outros grupos perceberam que na TOM os orbitais antiligantes são importantes para a teoria, aproveitando as ideias dos dois grupos que trouxeram esse modelo na aula passada. Ao final da construção, as equipes trouxeram com maior frequência a menção a TOM. Esboços de quadrados representando os orbitais e de spins mostraram a ideia de um cancelamento de elétrons em orbitais ligantes e antiligantes.

Um grupo descreveu a trajetória entre os modelos justificando que o uso de modelos mais simples era o suficiente para tratar o di-hidrogênio. Em contrapartida, a não existência do di-hélio necessitaria de algum modelo mais avançado já que outros gases nobres realizavam ligações. Essa percepção da modificação de modelos e da aplicabilidade de cada um foi muito interessante e valorizada em sala.

De forma geral, a discussão pôde confrontar as concepções de ligação química trazendo dinamismo a aula.

Comentários gerais acerca do Diário de Aula 4

A quarta aula da UDM seguiu de forma expositivo-dialogada retomando as ideias de Lennard-Jones. Com isso foi possível lembrar a origem dos orbitais antiligantes que, praticamente, não aparecem junto a TLV. Assim, esse início de aula marcou uma diferença entre as duas teorias que seria levada adiante pelos diagramas de orbitais moleculares.

Por tratar de orbitais, uma revisão sobre a representação desses e dos sinais de fase que o acompanham foi realizada através dos *slides*. Além de lembrar, essa parte teve como intuito trazer que as interações entre os orbitais não são possíveis para quaisquer combinações. Com isso, novamente os orbitais ligantes e antiligantes puderam ser retratados de forma mais clara quanto a posição que ocuparão em diagramas de orbitais moleculares.

A organização dos diagramas de orbitais moleculares foi realizada a partir de exemplos como o genérico A_2 e a molécula H_2 em *slide* e em lousa. Em sequência, os diagramas de orbitais moleculares das espécies He_2 até N_2 foram abordados por meio do *slide*. O cálculo de ligação também fez parte dessa etapa e usado para prever a existência de cada espécie.

Em geral, essa aula teve menor interação aluno-professor, porém o contato dos alunos com a interpretação de ligação química e o processo de socialização da modelagem permitiu com que a ideia da organização dos orbitais em diagramas se tornasse algo mais natural rompendo com o aspecto estritamente abstrato e decorativo. Nessa aula a junção de modelos, ligação química e TOM puderam adquirir forma, revelando uma maneira consistente de abordagem. Além da organização dos diagramas de orbitais moleculares para espécies diatômicas homonucleares, houve a menção aos orbitais de fronteira HOMO e LUMO nesses diagramas. Para validar as exposições da TOM, a espectroscopia de fotoelétrons compôs a aula.

Ao final da organização dos diagramas de orbitais moleculares, um exercício sobre o N_2 foi passado como tarefa individual em sala. Com o diagrama de orbitais moleculares do N_2 em lousa, os estudantes deveriam prever a estabilidade das espécies neutra e iônicas. Durante a tarefa foi possível notar 2 caminhos a se seguir: uso exclusivo da ordem de ligação e construção do diagrama de orbital molecular e cálculo da ordem de ligação. Nesse momento de “mãos à massa” os estudantes chamaram o professor com frequência para tirar dúvidas. Alguns usaram o diagrama da lousa para já relacionar a estabilidade, outros construíram seus próprios diagramas para cada espécie e tinham dificuldade em relacionar a mudança de ocupação dos orbitais com a estabilidade. A tarefa e as dúvidas foram importantes por propor, em momento inusitado, algo que não dependeria de uma mera cópia de diagrama. Assim, o que se notou foi um engajamento da maioria dos alunos na tarefa. Embora a maioria se comprometesse com a atividade, alguns alunos pareciam mais preocupados com o almoço no restaurante universitário da faculdade o que prejudicou a entrega de uma das tarefas.

Comentários gerais acerca do Diário de Aula 5

Nesta aula houve uma devolutiva da atividade do nitrogênio retomando a ordem de ligação e a organização dos diagramas de orbitais moleculares. A continuidade do estudo da TOM se deu a partir de uma atividade de modelagem sobre o comportamento magnético das moléculas N_2 e O_2 .

Novamente divididos em grupos, os alunos receberam as instruções da atividade. Enquanto alguns grupos discutiam como construir o diagrama de orbitais moleculares para a água, outros especulavam o estabelecimento da ligação química entre ímã e bolha. A passagem por grupo em grupo permitiu observar a diversidade de falas e a dificuldade em separar ligação química de interação magnética. Após a socialização dos modelos e apresentação de vídeo com experimento do paramagnetismo O_2 feito em laboratório da Universidade, a maioria dos grupos discutiu a modelagem com base nas diferenciações entre os diagramas de N_2 e O_2 . O que pareceu foi que, apesar de alguns grupos terem efetivamente entendido a diferença de comportamento magnético dessas espécies, outros se atentaram a ver a distinção entre os diagramas sem entender propriamente o que aquilo remetia. Isso foi um ponto não previsto pelo docente, pois o campo magnético aparece como conteúdo do Ensino Médio. Logo, isso sugere que para uma aplicação futura é necessário fazer uma adequação, como a inserção da interação dos elétrons e do campo magnético na sequência de aulas da disciplina para que esse momento seja de maior compreensão pelos discentes.

Comentários gerais acerca do Diário de Aula 6

A última aula começou com a retomada da aula anterior, lembrando a atividade do N_2 e O_2 . Novamente, foram reforçados a não formação de ligação química para esse caso e a atuação dos elétrons como pequenos ímãs sujeitos ao campo magnético. Os diagramas de orbitais moleculares do N_2 e O_2 foram colocados lado a lado em *slide* para comparação. Nesse momento, se abordou de maneira expositivo-dialogada a inversão sigma-pi. Em sequência, o docente trabalhou os diagramas de orbitais moleculares das espécies F_2 e Ne_2 .

Posteriormente, a representação de um diagrama para moléculas diatômicas heteronucleares foi apresentada pelo professor que destacou a disparidade de localização dos orbitais de átomos diferentes. De posse dessa representação, assim como todo o material usado em aula até então, os alunos foram desafiados a responder uma única pergunta em grupo. Através de sorteio, um grupo ficou com a questão de número 1 enquanto a cada dois grupos as

questões seguintes foram atribuídas pela sorte. Os grupos com a mesma questão poderiam conversar entre si.

Os grupos apresentaram suas resoluções com correção mútua do grupo parceiro e do professor. Foram trabalhados nos exercícios a construção dos diagramas, o cálculo e a interpretação de um resultado da ordem de ligação, os orbitais de fronteira, a energia de ionização e afinidade eletrônica e a comparação dos modelos TOM e TLV.

Em suma, a UDM organizada junto ao EFM se mostrou bastante dinâmico, promovendo a aproximação dos alunos com o professor o que é importante para o estabelecimento de diálogos. Além disso, a interpretação da ligação química foi discutida da segunda a última aula, reforçando o tratamento da TOM a distribuição dos elétrons pelos orbitais moleculares. As diferenciações entre as teorias foram trabalhadas através das atividades e do diálogo com a sala.

No início dessa aula, o professor conversou com os alunos sobre o horário da aula. Em calendário, as aulas matinais ocorrem até às 12h10min. Porém, nas duas últimas aulas, alguns alunos já se mostravam incomodados antes mesmo das 11h30min.

Processo de modelagem

A atividade de modelagem descrita a seguir considera a identificação de limitações de teorias de ligação química anteriores a Teoria do Orbital Molecular (TOM) para que sejam todas exploradas como modelos científicos. Tomando-as como modelos é natural que surjam abrangências e limitações. Na história de desenvolvimento da TOM é encontrado o forte vínculo com a mecânica quântica que também consta na Teoria da Ligação de Valência (TLV). Por meios matemáticos e de expressão, a TOM se tornou mais popular a partir dos anos de 1960. Entretanto, a TLV é um modelo válido para muitas explicações do mundo químico. Logo, nessa atividade, se propõe que os estudantes transitem por modelos de ligação química, desde o conceito e a representação dessa por Lewis, passando pela TLV e chegando a TOM.

Partindo da proposta: *Elabore um modelo que explique a existência ou não existência da molécula de hidrogênio com base nas teorias de ligação química* – os estudantes foram convidados a pensar e a expressar se há a existência da molécula H_2 . Após os primeiros modelos, outro comando lhes foi solicitado: *Faça o mesmo para explicar a existência ou não existência da molécula de hélio*. Dessa maneira, a partir da abordagem de duas supostas entidades químicas, os estudantes deveriam relacionar os conhecimentos com base nas teorias de ligação química para explicação da existência dessas. Abaixo se encontram as transcrições feitas por 11 equipes com um total de 58 participantes.

6.1.2 Transcrições dos modelos expressos pelos grupos

Abaixo encontram-se as transcrições dos modelos expressos por 11 grupos para as atividades de modelagem propostas na UDM. Essas atividades foram realizadas em sala de aula com as equipes possuindo 4 a 5 estudantes. As transcrições se encontram em estilo *itálico* e contam com as imagens das representações gráficas construídas pelos estudantes.

Transcrições e comentários: situação da existência de moléculas

Grupo 1 – Gilbert Lewis

1) Segundo a teoria do octeto, o hidrogênio se estabiliza com dois elétrons se igualando ao hélio que tem dois elétrons na camada de valência que é um gás nobre, ou seja, estável. Portanto, a molécula de hidrogênio existe.

2) Desta forma, o hélio não é uma molécula pois é um gás nobre.

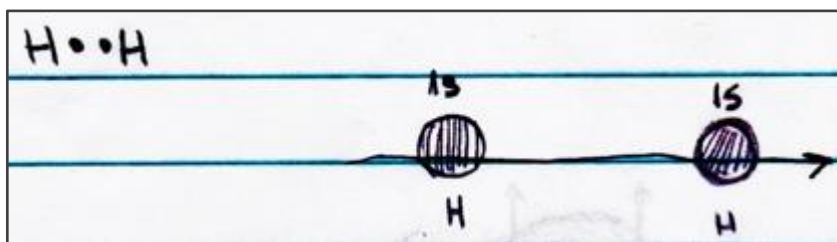


Figura 45 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 1.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo diz que a molécula de hidrogênio existe porque faz a associação da estabilidade, assim ao adquirir dois elétrons, o hidrogênio se estabiliza adquirindo configuração de um gás nobre, no caso o hélio. Percebe-se que há a associação da estabilidade com os gases nobres o que é reforçado ao expor que o hélio não forma moléculas, por ser um gás nobre. Na **Figura 45**, expressam a combinação de orbitais 1s do hidrogênio o que remete a Teoria da Ligação de Valência, embora não haja menção disso no texto.

Grupo 2 – Linus Pauling

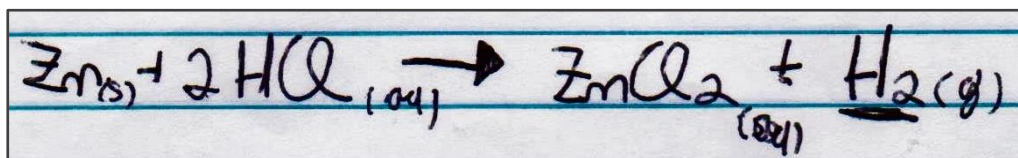


Figura 46 - Representação através de reação química para a molécula di-hidrogênio do Grupo 2.

Fonte: Dados da pesquisa.

Inserção de zinco metálico em solução de HCl, onde o Zn reage com o Cl e na reação exotérmica é liberado H₂.

O Hélio está na composição do Sol, também o Hidrogênio em sua forma estável é quimicamente igual do He.

O grupo recorre a observações de cunho experimental para falar que a molécula H₂ existe, revivendo uma memória visual de uma prática de laboratório (**Figura 46**). Quando questionados sobre a molécula de hélio, partiram da composição solar para comentar que há existência do átomo de hélio, mas não mencionaram sobre a molécula. Isso pode indicar a dúvida sobre a inexistência ou existência da molécula em questão já que levando em consideração a memória dos conhecimentos fenomenológicos, não trouxeram registros de alguma reação com a suposta molécula He₂.

Grupo 3 – Werner Heisenberg

→A existência do hidrogênio

A molécula de H_2 existe, pois ela participa de várias reações, como a formação da água e da amônia

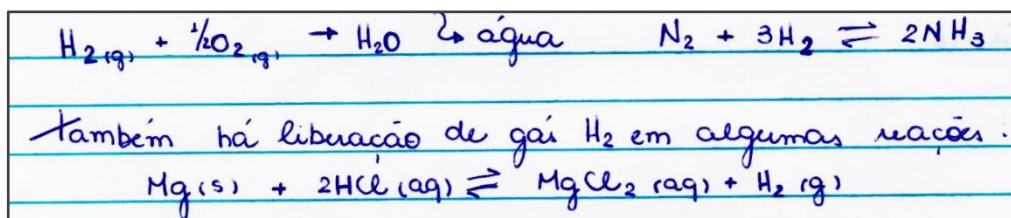


Figura 47 - Representação através de reação química para a molécula di-hidrogênio do Grupo 3.

Fonte: Dados da pesquisa.

A existência do Hélio

O átomo de hélio existe, porém, a molécula não, pois como ele é um elemento estável, já possui 8 e^- na camada de valência, ele não realiza ligações.

O grupo 3 também se vale do conhecimento fenomenológico e representacional para justificar a existência da molécula de hidrogênio, afinal se ela participa da formação da água, então deve existir. Além desse, há um aspecto teórico ao trazerem o conceito dos oito elétrons na camada de valência para o hélio, algo que destaca um modelo microscópico no trato da questão. Para o hélio, o grupo opta pelo caminho da estabilidade. Entretanto, percebe-se que há uma confusão: usam a regra do octeto ao colocar a estabilidade em função de 8 elétrons na camada de valência, sendo que o hélio não possui a mesma configuração que os demais da sua família. É interessante destacar que o grupo transita por entre os aspectos fenomenológicos de maneira macroscópica para uma visão microscópica quanto a entidade química e o conceito inerente a regra do octeto.

Grupo 4 – Walter Heitler

$H -$

A molécula de H_2 existe. O número de elétrons no orbital ligante é maior que dos orbitais antiligantes. Segundo a TLV, são necessários orbitais se sobrepõem através dos elétrons desemparelhados.



Figura 48 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 4.

Fonte: Dados da pesquisa.

$He_2 -$

O número de elétrons nos orbitais ligantes e antiligantes são iguais não havendo força atrativa para estabilizar a molécula.

Elétrons de valência influenciam na estabilidade da molécula.

Orbital do He tá estável (completo) não é energeticamente favorável.

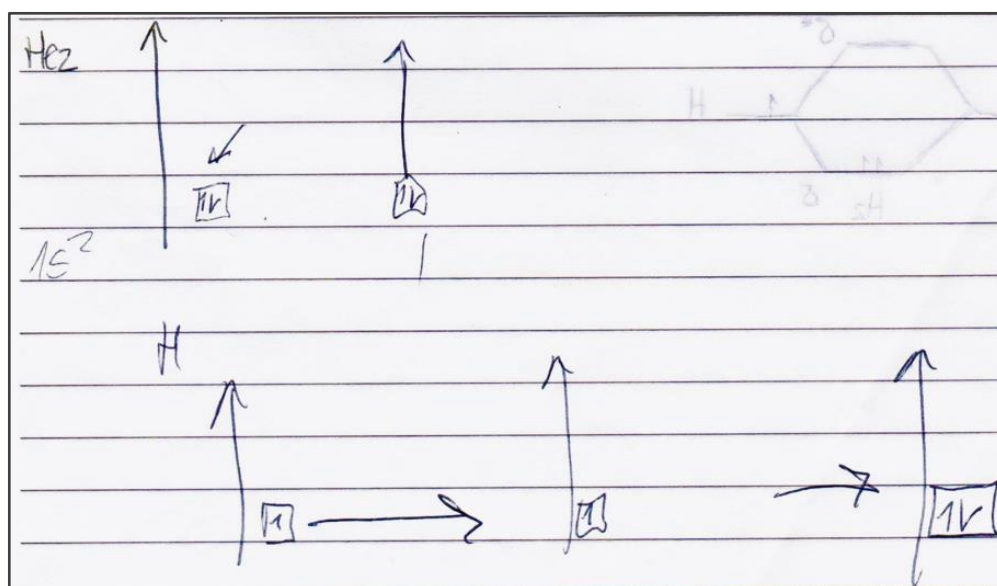


Figura 49 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 4.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo usufruiu da Teoria da Ligação de Valência (TLV) para explicar a existência da molécula di-hidrogênio conforme a **Figura 48** que trata da sobreposição dos orbitais 1s. Da TLV trazem o conceito de orbitais e a sobreposição desses para formação da ligação química. Além disso, há um ponto muito bem colocado pela equipe: a quantidade de elétrons distribuídos entre os orbitais ligantes e antiligantes. Sabe-se que a ligação química é enfraquecida pelo preenchimento dos orbitais moleculares antiligantes, podendo anular a ordem de ligação com a ocupação igualitária de orbitais moleculares ligantes e antiligantes. Ao usar a TLV o grupo não traz o termo “orbital molecular”, o que está correto, visto que, esse termo é usado na perspectiva da TOM. Ao mencionar os elétrons desemparelhados se vê que houve um reconhecimento da posição dos spins para emparelhamento que são, costumeiramente, representados através de setas em sentidos opostos para refletir a organização de um estado de baixa energia. Não fica claro se o grupo recorda o Princípio da exclusão de Pauli em que dois elétrons não podem apresentar os mesmos quatro números quânticos em um orbital.

Para justificar a não existência da molécula de di-hélio, o grupo usou várias direções, demonstrando uma tentativa de estabelecimento de conexões em meio ao campo seguro da estabilidade de um gás nobre. Partindo dos princípios da TOM, trouxeram que não há uma força atrativa suficiente para formação da molécula quando o número de elétrons nos orbitais ligantes e antiligantes é igual. Para complementar, elencaram que os elétrons de valência influenciam na estabilidade eletrônica o que pode sugerir um conteúdo latente das propriedades intrínsecas energia de ionização e afinidade eletrônica quanto a tendência em compartilhar elétrons. Ao sugerir que o orbital do hélio está estável porque está completo, imagina-se que tenham relacionado ao orbital molecular da suposta He_2 . A **Figura 49** ilustra parte do modelo da equipe para as espécies di-hélio e di-hidrogênio, em que os orbitais são representados como caixinhas em níveis de energia.

Grupo 5 – Robert Mulliken

A molécula de hidrogênio existe pois:

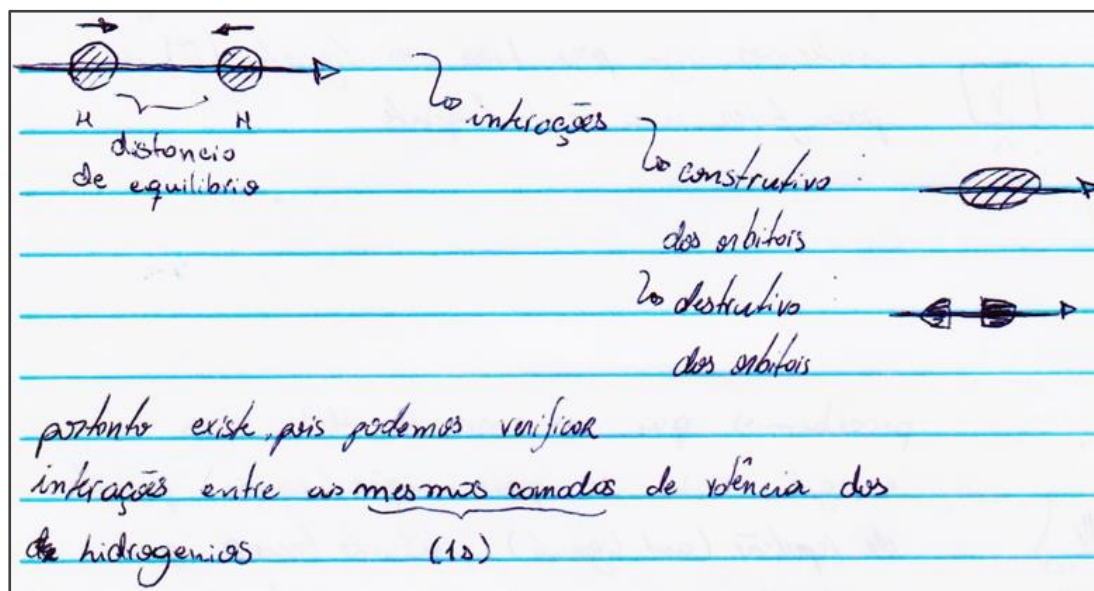


Figura 50 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 5.

Fonte: Dados da pesquisa.

Hélio: pelo hélio fazer parte dos gases nobres ele se estabiliza sozinho com 2 elétrons na camada de valência portanto não vemos interações do orbital de valência dele com outros orbitais.

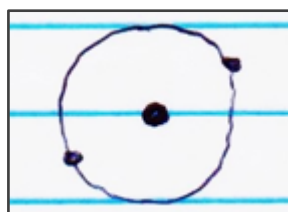


Figura 51 - Representação gráfica para o átomo hélio do Grupo 5.

Fonte: Dados da pesquisa.

A equipe justificou a existência do H_2 a partir da sobreposição de orbitais do hidrogênio como demonstrado na **Figura 50**. Na primeira representação gráfica, sob um eixo de orientação, são representados os orbitais 1s do hidrogênio em aproximação indicada pelas setas em sentidos opostos. Os estudantes colocaram que há uma distância de equilíbrio entre os orbitais atômicos

enquanto ainda se aproximam, o que pode promover em um leitor a lembrança do gráfico de energia potencial por distância de ligação. Esse gráfico mostra como a aproximação dos orbitais atômicos se relaciona com a energia potencial. Em pontos muito distantes, não há qualquer interação entre os orbitais, portanto não há uma ligação formada. À medida que se aproximam, a sobreposição dos orbitais atômicos aumenta até um ponto de equilíbrio entre as forças atuantes – atrativas e repulsivas. Nesse estágio a distância de ligação coincide com o valor mais baixo de energia potencial preconizando a distância e a energia da ligação. A distância de ligação sinaliza o comprimento da ligação. Caso haja maior aproximação dos orbitais atômicos, a energia potencial é elevada por conta do predomínio da repulsão entre as entidades eletricamente carregadas. Talvez a distância de equilíbrio que mencionaram seja a equivalente ao comprimento de ligação.

O grupo esboçou que dessa aproximação surgem as interações que podem ser do tipo construtiva ou destrutiva. Eles não explicaram detalhadamente como que essas interações corroboram na existência de H_2 , mas enfatizaram que a formação da ligação depende da interação nas mesmas camadas de valência ($1s$). Isso sugere que é necessária uma proximidade dos níveis de energia dos orbitais para sobreposição efetiva.

Já para o hélio, novamente, a explicação enfoca na estabilidade com dois elétrons desse gás nobre. Para ele o grupo não utiliza a mesma ideia que colocaram para o hidrogênio, como se para o hélio não fosse válido falar em interações construtivas e destrutivas entre os orbitais atômicos. Nesse caso, o hélio é representado por meio de um núcleo circular com dois elétrons ao redor, ou seja, o hélio é monoatômico **Figura 51**.

Grupo 6 – Fritz London

Sim, acreditamos que a molécula de hidrogênio (H_2) existe devido a regra do octeto, ou seja, como o hidrogênio tem $1e^-$ na camada de valência, é necessário mais $1e^-$ para atingir a estabilidade eletrônica (igual a hélio), isto é, ter uma camada preenchida ($1s^2$). Logo, os elétrons de valência dos dois hidrogênios, compartilham os e^- para atingir a regra do octeto.



Figura 52 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 6.

Fonte: Dados da pesquisa.

Hélio = Não existe a molécula de hélio, visto que ele já satisfaz a regra do octeto, onde sua camada de valência já se encontra preenchida ($1s^2$).

O grupo London usou a regra do octeto para explicar a existência de H_2 e inexistência de He_2 . Essa última entidade não é formada devido ao hélio já possuir a camada de valência preenchida. Baseado na estabilidade eletrônica do hélio, o átomo de hidrogênio realiza a ligação para completar o subnível $1s$ por meio do compartilhamento do par eletrônico. Na representação gráfica construída pela equipe **Figura 52**, seguindo a descrição, os elétrons são representados por pontos no centro de uma circunferência e o compartilhamento é retratado por traços que ligam esses pontos. As circunferências se sobrepõem. Ao lado, a equipe colocou dois eixos de energia, um eixo para cada subnível $1s$ de um átomo de hidrogênio. Ao expressar a formação de ligação através dos spins em orientações opostas (nas caixinhas como orbitais), o que seria o orbital de $1s^2$ é feito acima dos orbitais atômicos. A ligação química se forma justamente por um alcance de uma menor energia potencial do orbital molecular quando comparada aos orbitais atômicos isolados. Dessa maneira, há uma confusão na disposição da energia.

Grupo 7 – Lennard-Jones

Molécula hidrogênio

Pode ser explicado através da teoria, modelo de Lewis, em que os orbitais se completam e entram num estado de estabilidade.

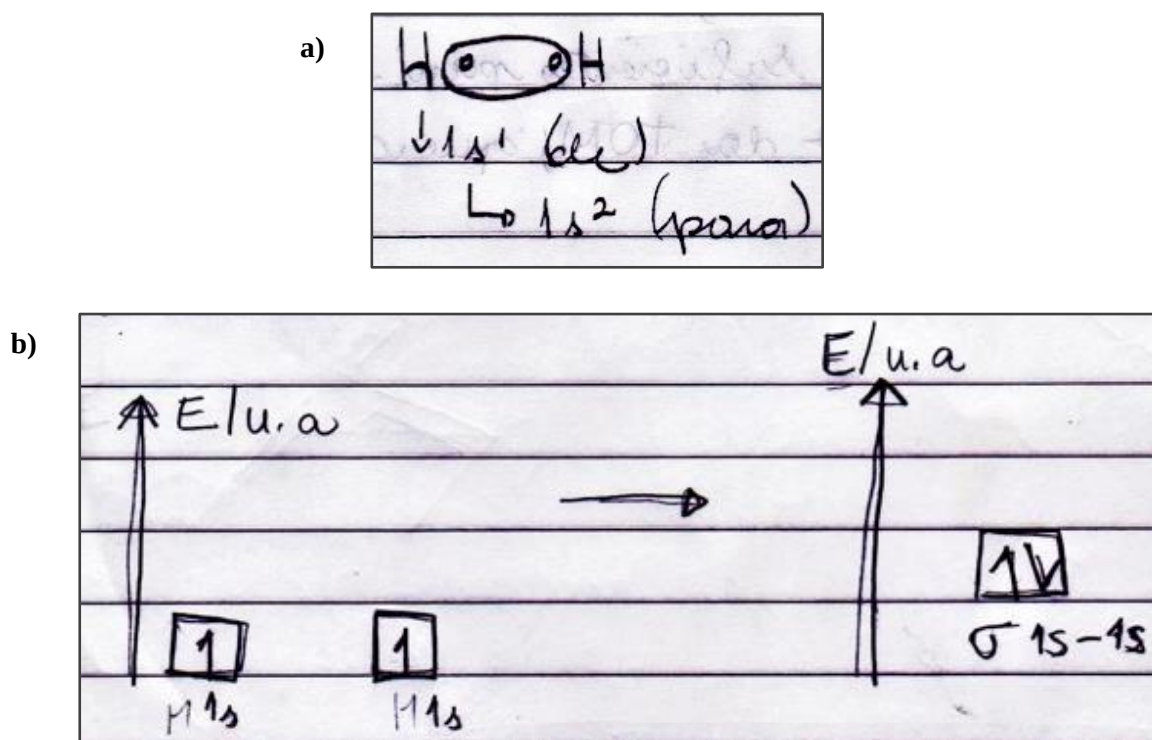


Figura 53 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 7.

a) Compartilhamento de elétrons entre hidrogênios. b) Formação do orbital σ (1s-1s).

Fonte: Dados da pesquisa.

Junto a isso, também é possível evidenciar por meio da TLV.

Molécula de hélio

A existência do hélio pode ser compreendida através de sua distribuição eletrônica no qual seria $1s^2$, portanto possui a sua camada totalmente completa sendo desfavorável sua ligação com outra espécie.

O grupo justifica a existência de H_2 firmados em Lewis e na TLV de acordo com a **Figura 53**. Para o modelo de Lewis citam que os orbitais se completam quando, na verdade, são os elétrons que são compartilhados (**Figura 53 – a**). Os orbitais são assim identificados anos depois por Mulliken. Similarmente ao grupo 6, aqui há um eixo de energia e o orbital $1s^2$,

identificado como σ 1s-1s, também é posicionado em energia superior aos orbitais atômicos. A identificação sigma faz pensar que lembram da interferência construtiva entre orbitais, porém não souberam naquele momento usá-la como um fator de abaixamento de energia.

Para a molécula de hélio trouxeram algo adicional. O grupo disse que é desfavorável a ligação com outra espécie porque a camada $1s^2$ é preenchida. Em seguida, esboçam o diagrama de orbitais moleculares para o He_2 (**Figura 53-b**). O grupo não explica o motivo do diagrama se fazer presente na resposta, mas considera corretamente o preenchimento de orbitais moleculares ligante e antiligante. Conversando com eles em sala, relatam que o preenchimento igualitário dos orbitais moleculares ligante e antiligante anulam a ligação química.

Grupo 8 – Edward Condon

A molécula de hidrogênio existe, porque o hidrogênio se torna mais estável adquirindo a configuração eletrônica do hélio. Pra isso dois átomos de hidrogênio precisam compartilhar seus 2 elétrons fazendo a ligação H-H.

A molécula de hélio não existe, devido a todo o preenchimento de seu orbital s. Se o mesmo compartilhar elétrons em ligações ficaria menos estável.

Novamente, H_2 existe por conta do compartilhamento de elétrons que permite a configuração mais estável a ser alcançada pelo hidrogênio – a do átomo de hélio. Esse, por sua vez, perderia a estabilidade ao compartilhar elétrons já que o orbital s é totalmente preenchido.

Grupo 9 – Leland Allen

- I. *A molécula de hidrogênio (H_2) existe, pois ele atinge a estabilidade ao compartilhar os elétrons de valência.*

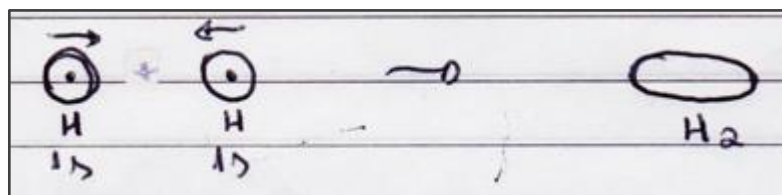


Figura 54 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 9.

Fonte: Dados da pesquisa.

- II. Não existe forma molecular do hélio, pois ele já está estabilizado com sua camada de valência preenchida.

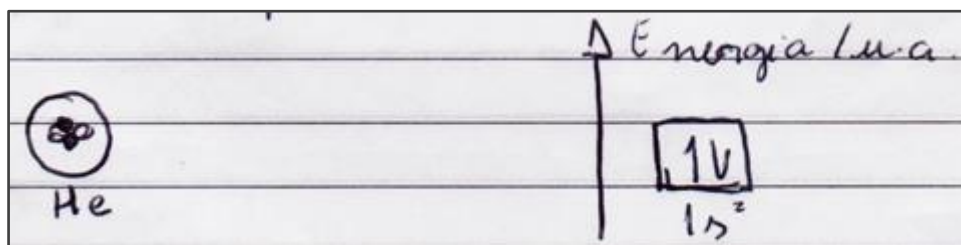


Figura 55 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 9.

Fonte: Dados da pesquisa.

A equipe utiliza a mesma explicação do grupo 8. Para o hidrogênio retratam os orbitais atômicos $1s$ se aproximando e gerando um orbital para H_2 que lembra o orbital molecular ligante (**Figura 54**). Para o hélio representam duas estruturas: a do átomo em que há dois pontos preenchidos e dois não preenchidos que não estão identificados, os quais, se presume tratar de dois prótons e dois nêutrons. Ao lado, há um eixo de energia e o posicionamento de uma caixa representativa do orbital $1s^2$ com dois spins emparelhados na condição de maior estabilidade (**Figura 55**).

Grupo 10 – Erwin Schrödinger

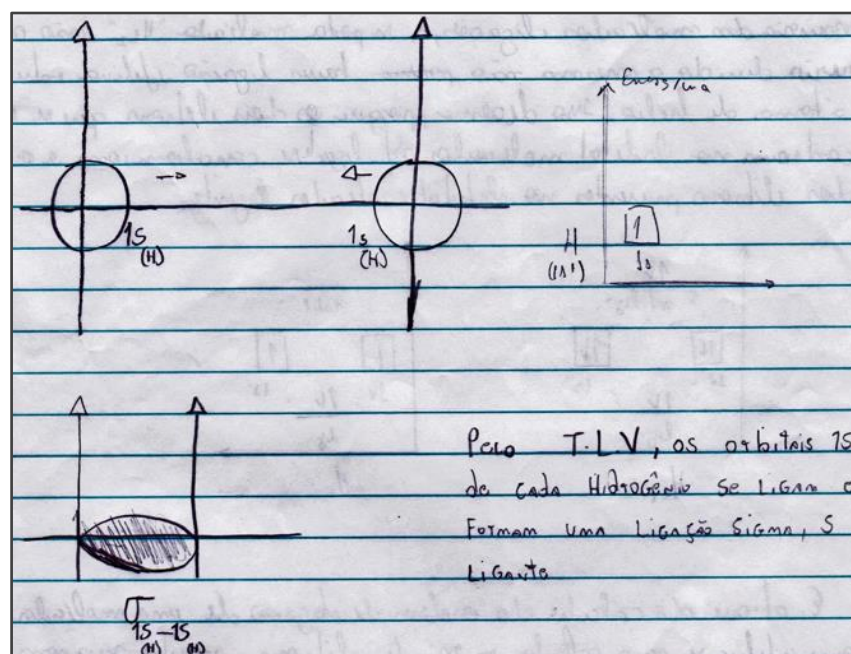


Figura 56 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 10.

Fonte: Dados da pesquisa.

Pelo TLV, os orbitais 1s de cada hidrogênio se ligam e formam uma ligação, sigma s ligante.

Pela teoria do octeto, como He é um gás nobre ele já está no seu estado mais estável, portanto ele não precisa fazer ligação com outros átomos.

A TLV é usada para dar suporte a existência do H_2 a contar da formação do orbital sigma 1s-1s (**Figura 56**). Sobre o He_2 , concluíram que não existe porque o hélio é gás nobre que já está em seu estado mais estável e não precisa fazer ligação com outro átomo. Novamente a regra do octeto surge para justificar a questão em torno do hélio.

Grupo 11 - Friederick Hund

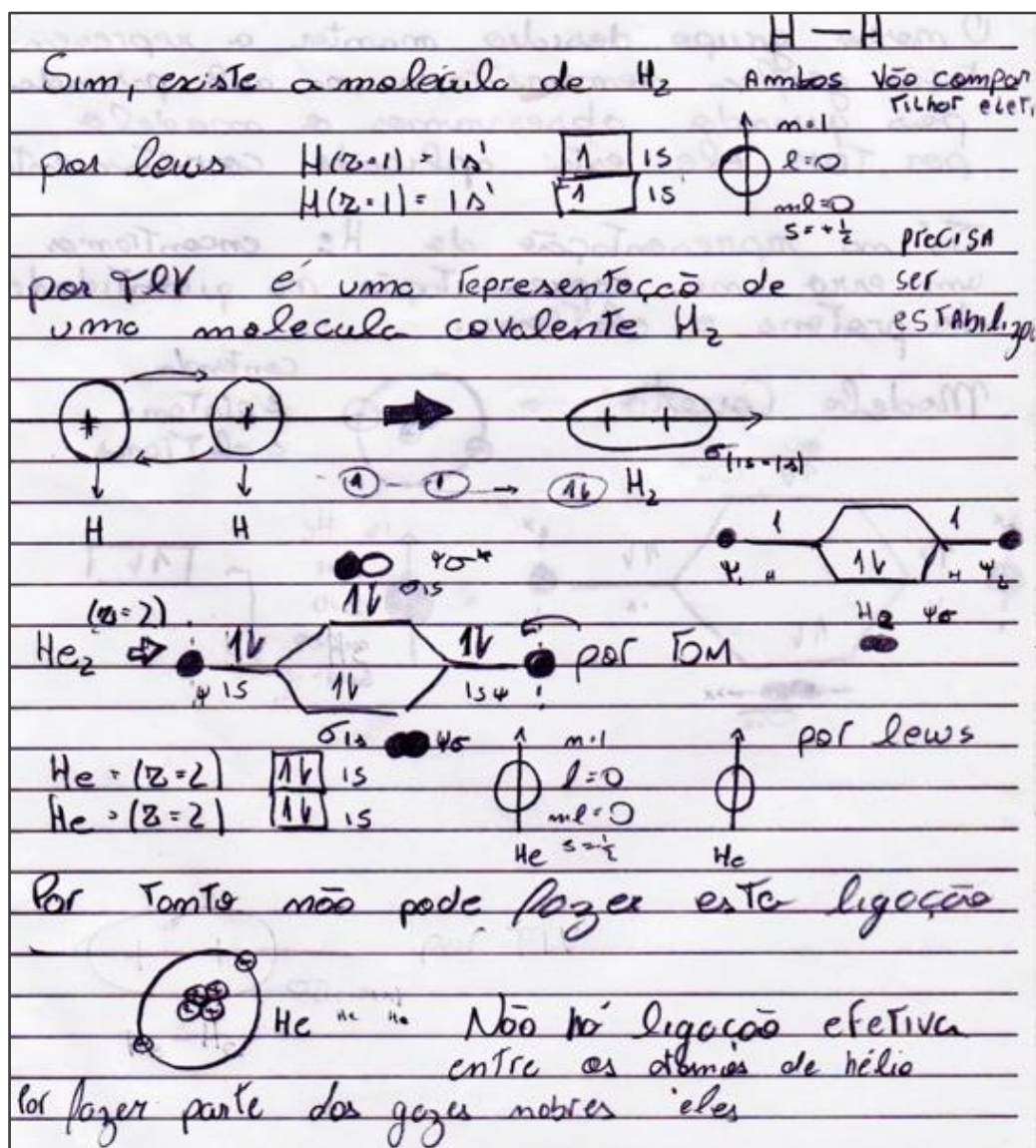


Figura 57 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio e di-hélio do Grupo 11.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo utilizou vários recursos em suas justificativas como mostra a **Figura 57**. Os modelos de Lewis, TLV e TOM foram citados. Para o H_2 , nota-se que reconhecem a existência da molécula por todos os modelos. Não houve um texto que conectasse todas as ideias para as espécies trabalhadas, mas é nítido o reconhecimento de conteúdo. Nessa equipe em questão, um dos alunos é da turma anterior e durante a atividade se destacou ao explicar para o próprio grupo o que sabia sobre os modelos. O discente também estudava com dois colegas do grupo, fora do horário de aula. Nenhum dos outros membros foi contra o que o colega pretendia colocar em papel.

Reflexão geral

Nesse primeiro momento, a disposição inclinada a regra do octeto foi bastante evidente. Isso reflete a dificuldade dos estudantes, mesmo os de graduação, a se desvencilharem de algo que lhes é repetido desde o ensino médio se aproximando de um dogma no ensino das ligações químicas. Frequentemente citada na explicação da existência do H_2 e na inexistência do He_2 , a regra do octeto surge como base sólida de apoio dos discentes. Se H_2 existe é por conta da estabilidade alcançada pelo hidrogênio no compartilhamento eletrônico. Não é uma estabilidade que atinja 8 elétrons, mas é vinculada ao alcance da camada de valência $1s^2$ como totalmente preenchida. A mesma ideia de estabilidade e preenchimento do subnível s é aplicada para o hélio. Como consta na família 18 (antiga família 8 A), é denominado de gás nobre. Por ser “nobre”, já se mantém estável, não precisando realizar ligações. Já os outros companheiros de grupo atendem ao octeto, sendo ambos estáveis. Consequentemente, regra do octeto e estabilidade surgem juntos nas respostas.

Dois grupos optaram por falar das moléculas por meio das vivências experimentais, traduzindo seus modelos em reações químicas. Por conseguinte, a existência do hidrogênio era facilmente explicada.

Alguns outros grupos optaram pela TLV. Afinal, a sobreposição de orbitais s justifica a ligação entre hidrogênio – hidrogênio. Mas, e para o hélio? Em grande parte, novamente, a estabilidade do gás nobre o justifica como inexistente. Além disso, como acomodar os 4 elétrons apenas em um orbital ligante?

Em relação a TOM, dois grupos buscaram a explicação da existência das moléculas usufruindo da distribuição eletrônica em orbitais ligantes e antiligantes. Por este caminho, não há uma justificativa que remeta a uma estabilidade “decorada”. A própria regra do octeto é enfraquecida pelo comportamento dos elementos químicos do terceiro período em diante da tabela periódica devido a expansão da camada de valência. E isso não é diferente para os gases nobres. O hélio pode não realizar ligações em condições fora de um certo extremo de temperatura e pressão. Porém, não se pode dizer o mesmo do xenônio conhecido, principalmente, pelos intrigantes compostos com flúor. No momento que um aluno do grupo 8 questiona durante a socialização o porquê alguns gases nobres realizavam ligações e outros não, a dinâmica assumiu postura totalmente diferente. Os grupos foram desafiados a lidar com essa informação. Inicialmente, boa parte das equipes ainda creditava seus modelos na regra do octeto, tratando esse questionamento com surpresa, afinal somente o hélio não faria ligações?

Como escapar da regra do octeto agora? Como tratar pela TLV? Novos rumos foram tomados pela maioria da sala.

Remodelando

Grupo 1 – Gilbert Lewis

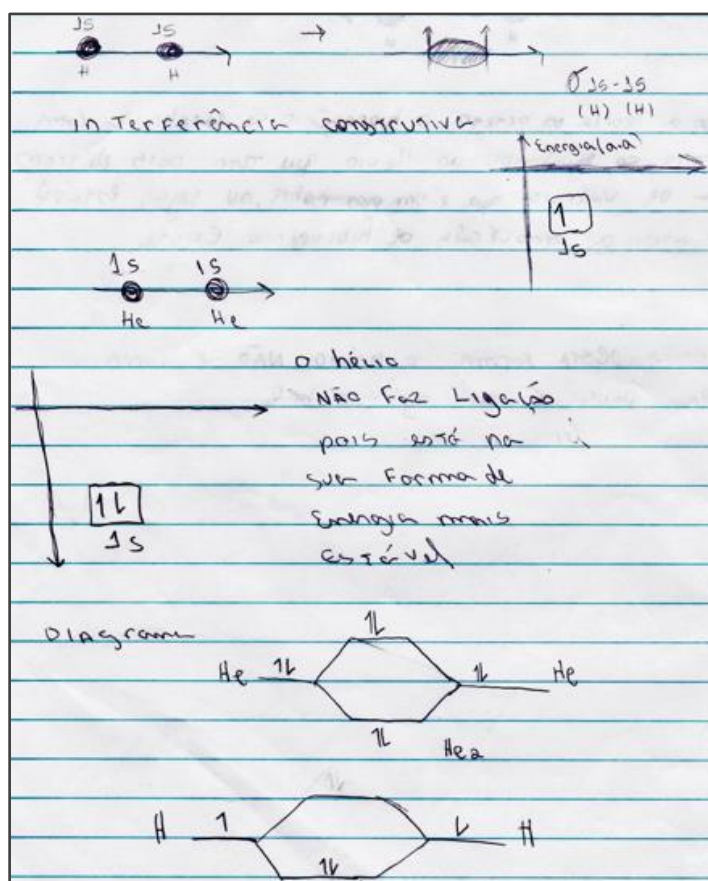


Figura 58 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio e di-hélio do Grupo 1 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo manteve a decisão inicial, porém melhoraram o desenho para a formação do H_2 com o orbital $\sigma 1s-1s$. Para o hélio chegaram a esboçar o diagrama de orbital molecular, mas não explicam como que isso ajuda a falar da inexistência da molécula e reafirmam que o mesmo não faz ligação, pois já está em uma forma de energia mais estável (**Figura 58**). Consequentemente, ainda não conseguiram se desprender da estabilidade de um gás nobre nas suas explicações, sem avançar para a exploração dos orbitais formados a partir da sobreposição

de funções de onda. O princípio de compartilhamento de elétrons para estabilidade se faz presente na escolha de caminhos que não ampliam o uso dos orbitais.

Grupo 2 – Linus Pauling

Os gases nobres em sua maioria irão reagir apenas em situações específicas, ou seja, em um laboratório já preparado. Em condições normais eles raramente reagem, por isso as moléculas desses elementos são anormais.

O grupo focou apenas na questão do hélio na segunda parte. Novamente, optaram por lembranças do laboratório e usaram o celular para tentar responder à questão. Como não viram nenhuma evidência de reações com hélio em condições brandas, concluíram que a molécula não existe, sem saber discutir por vias de ligação química. Não mencionaram quais gases nobres podem reagir, mas perceberam que até mesmo as reações com esses elementos não se dão de forma tão fácil quando comparado a outros elementos mais reativos.

Grupo 3 – Werner Heisenberg

→A existência do hidrogênio

Além disso, a existência do hidrogênio pode ser justificada através do diagrama de energia, visto que o seu elétron desemparelhado necessita de mais um elétron para alcançar a estabilidade.

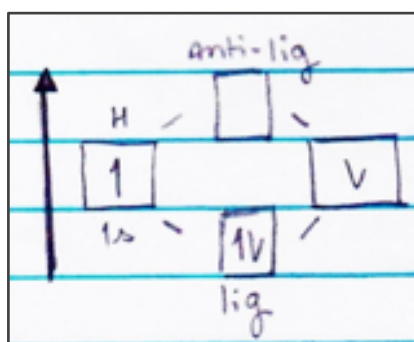


Figura 59 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 3 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

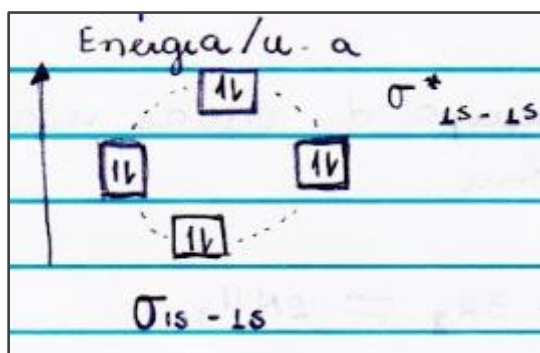


Figura 60 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 3 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

→ *A existência do hélio*

A existência do hélio pode ser justificada por meio do diagrama de energia, considerando que a ligação, uma vez que possuem elétrons que ocupam os orbitais ligantes e antiligantes.

O grupo avançou quanto ao apresentado anteriormente. Se reorganizaram e focaram em uma explicação com maior aspecto teórico e representacional. Para ambos os elementos esboçaram um diagrama de energia, posicionando corretamente os orbitais ligantes e antiligantes em relação aos orbitais atômicos 1s como mostram as **Figura 59** e **Figura 60**. Usaram do preenchimento completo do orbital ligante e orbital antiligante para justificar que o hélio existe. Conversando com o grupo, eles entenderam que é desse preenchimento total que se explica a inexistência da molécula de hélio, pois a TOM utiliza todos os elétrons distribuídos por orbitais moleculares resultando em uma ordem de ligação nula neste caso. É interessante destacar que ao incluir os orbitais antiligantes o grupo avança em direção a TOM, compreendendo um aspecto fundamental: a existência de orbitais que vão além dos ligantes.

Grupo 4 – Walter Heitler

Ligação H₂: existe

- *Combinação de orbitais (1s² completo)*
- *Estabilidade energética*
- *Atração entre os e⁻ desemparelhados*

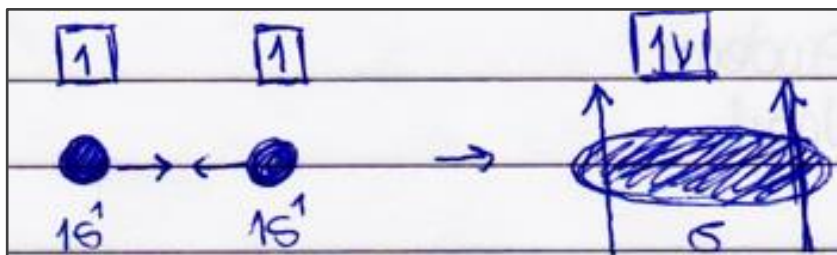
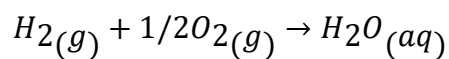


Figura 61 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 4 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

Comprova-se que em condições normais a molécula de H_2 forma-se espontaneamente.



- *A quantidade de e^- no orbital ligante é maior que do antiligante necessário para sobreposição conforme a TLV*

Ligação He_2

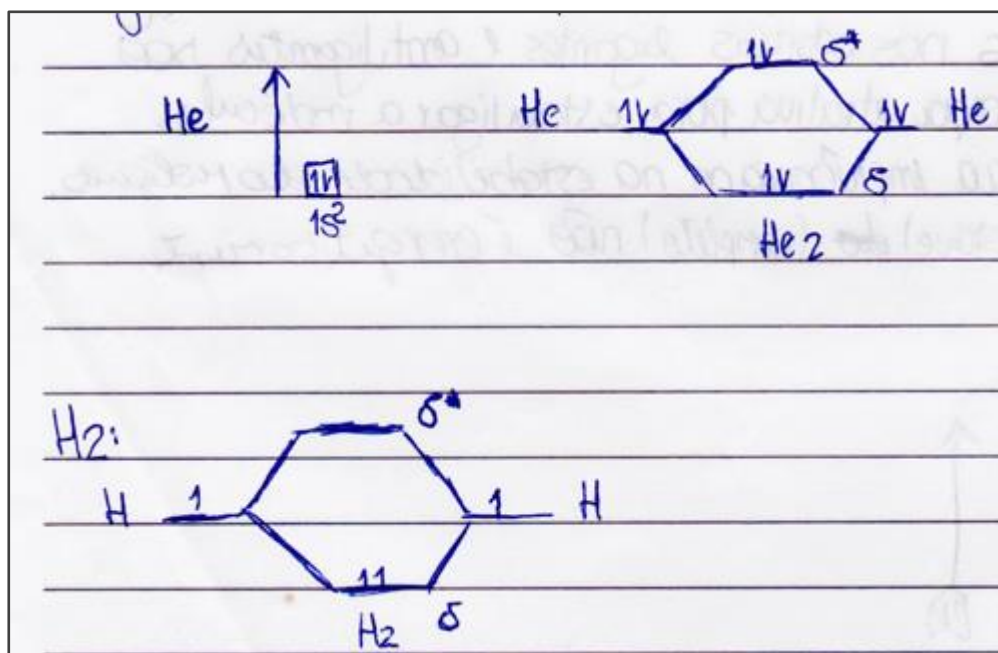


Figura 62 - Representação gráfica para a molécula di-hélio e di-hidrogênio do Grupo 4 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

- Não é favorável energeticamente, o orbital $1s^2$ está completo. A ligação não tem força atrativa para se manter estável

O grupo manteve o modelo do primeiro momento e usou desse tempo para organizar as informações em tópicos e redesenhar os orbitais do hidrogênio. Desse modo, esboçaram o orbital sigma $1s-1s$ e o diagrama de orbitais moleculares para o H_2 e He_2 como mostram as **Figura 61** e **Figura 62**. A equipe soube trabalhar com os orbitais ligantes e antiligantes e continuou usando a ideia da ordem de ligação na resposta. Além disso, escreveram uma reação química em um dos tópicos como comprovante da existência do H_2 .

Grupo 5 – Robert Mulliken

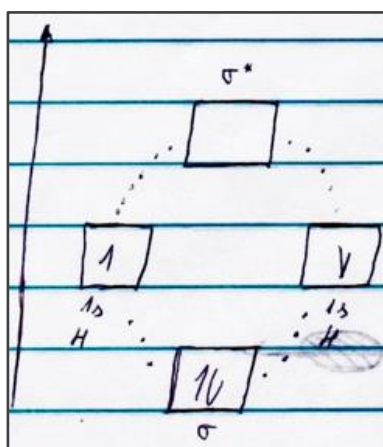
Não mudamos nosso raciocínio sobre a existência da molécula de hidrogênio e a não molécula de hélio, porém observamos algo ao compararmos as interações do hidrogênio e do hélio.

Do hidrogênio

Percebemos que há uma energia nas interações, seja para fazer um ligante (σ) ou para fazer um anti-ligante.

Percebemos que no caso do Hélio não há energia, tanto de aproximação (ligação) quanto de repulsão (anti-ligante), portanto entendemos que o He não necessita formar uma molécula.

a)



b)

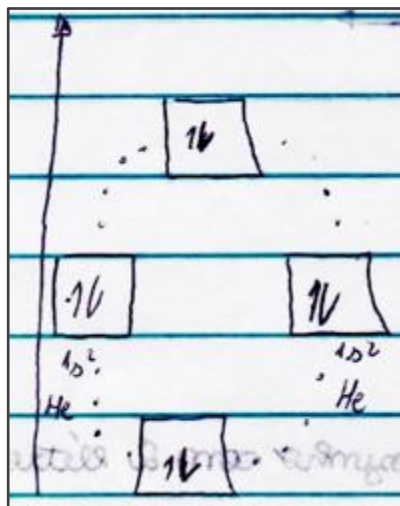


Figura 63 - Representação gráfica para as moléculas do Grupo 7. a) Di-hidrogênio. b) Di-hélio.

Fonte: Dados da pesquisa.

A equipe não mudou a conclusão acerca da pergunta, porém eles observaram a energia nas interações entre orbitais atômicos, produzindo orbitais ligantes e antiligantes como visto na **Figura 63**. Ao justificar a inexistência do He_2 e dizer que “não há energia, tanto de aproximação (ligação) quanto de repulsão (anti-ligante)”, provavelmente, houve uma certa confusão ao se apresentar a ideia porque ocorre o enfraquecimento da ligação ao se preencher de forma igualitária os orbitais ligantes e antiligantes, algo que o grupo fez corretamente. Assim, entende-se que o grupo menciona que não há energia mesmo com a realização do diagrama, mas aparentemente, não se apropriaram totalmente do seu significado. Há um eixo, não identificado, mas que remete ao da energia ao leitor que conhece os diagramas. As interações são feitas por traços pontilhados, então o que se interpreta é que o grupo compreendeu que é necessário olhar para todos os orbitais formados (moleculares) para justificar, a inexistência de moléculas. Comparativamente, souberam aprimorar os modelos descritos na primeira etapa para a segunda, saindo da zona de conforto da regra do octeto e avançando no tratamento dos orbitais atômicos.

Grupo 6 – Fritz London

Mantemos os modelos anteriores, entretanto, para a explicação de não existir a molécula de hélio, acrescentamos que, além do elemento ser um gás nobre (camada totalmente preenchida), ele não expande sua camada de valência. Além disso, analisando o que foi dito por outros grupos, os elétrons antiligantes se cancelam com os elétrons ligantes, impedindo a ligação da formação π , podendo formar apenas ligação σ .

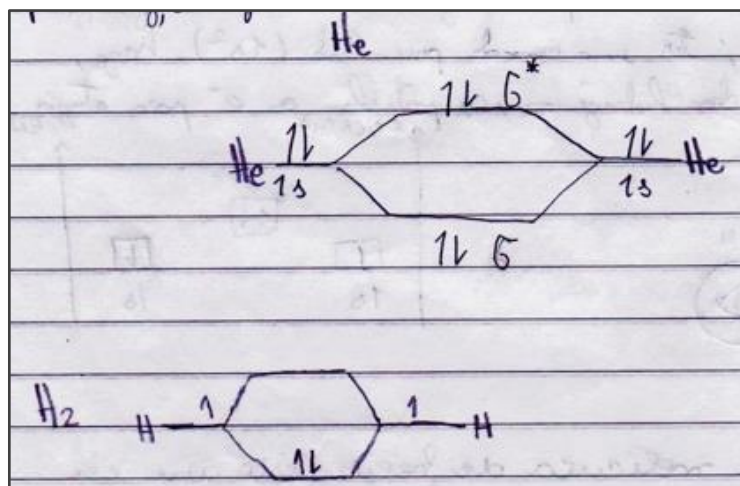


Figura 64 - Representação gráfica para as moléculas di-hélio e di-hidrogênio do Grupo 6 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo 6 manteve os modelos da primeira etapa, porém os complementaram. Acrescentaram que o hélio não expande a camada de valência – uma observação interessante visto que outros elementos da mesma família podem expandi-la. Além disso, assim como os grupos 4 e 5, passaram a considerar os orbitais antiligantes e a notar que o seu preenchimento total é responsável pela não formação da ligação química, conforme a **Figura 64**. Dessa maneira, ilustraram um diagrama de orbitais moleculares para o He_2 . É importante destacar que não são os elétrons que se cancelam, mas que a presença de planos nodais promove o aumento da energia do orbital antiligante o que não colabora para o estabelecimento da ligação.

Grupo 7 – John Lennard-Jones

Utilizamos a TLV e Lewis para explicar a existência da molécula de H_2 e não a TOM, pois os modelos de menor complexidade já possuem a capacidade de explicar, não necessitando de um modelo mais complexo.

Já para a molécula de He_2 , os modelos mais simples não possuem características suficientes para explicar, necessitando transitar para o modelo da TOM, que demonstra a não existência da molécula.

Por possuir uma orbital antiligante e ligante preenchidos, o efeito desestabilizar cancela o efeito estabilizador do orbital ligante, não havendo atração entre.

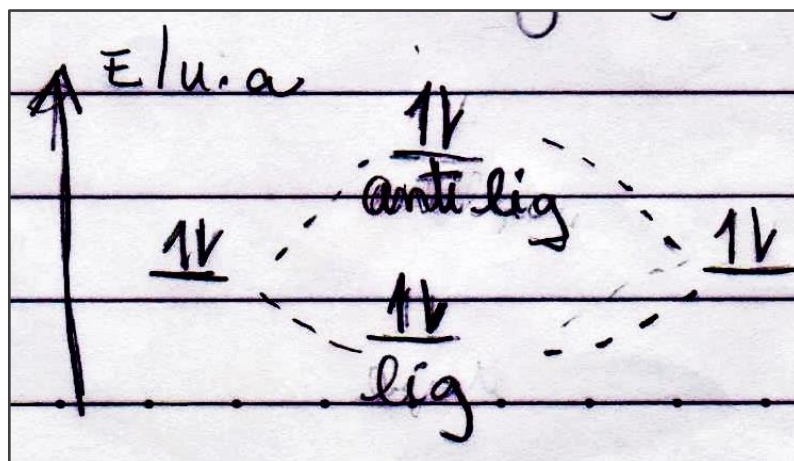


Figura 65 -Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 7 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

A equipe 7 preparou um texto explicando a transição pelos modelos. De forma objetiva e clara, relataram que a simplicidade de modelos permite tratar um assunto até determinado ponto, sendo então necessário o uso de outro recurso que permita superar algumas limitações. O grupo chegou à conclusão de que os modelos são ferramentas disponíveis ao homem de forma que funcionem bem em situações específicas e necessitem em outras serem aprimoradas. Para o hidrogênio, viram que o modelo de Lewis e a TLV previam corretamente a existência. Já para o hélio, somente a condição de estabilidade por ser um gás nobre se chocava com a existência de ligações feitas pelos outros parceiros da família 18. Ao recorrerem a TOM, puderam perceber uma nova forma de abordar a ligação química por meio da distribuição dos elétrons pelos orbitais moleculares conforme a **Figura 65**. Desse modo, a ligação química se desvincula da condição dogmática de “atingir o octeto” para abranger os casos de expansão da camada de valência, número ímpar de elétrons em moléculas e casos excepcionais como o do xenônio.

A equipe conseguiu perceber as abrangências e limitações dos modelos para o que foi proposto, selecionando os modelos mais simples para um caso que poderia ser tratado com os 3 modelos de ligação química e optando pela TOM para uma questão peculiar envolvendo os gases nobres. Isso é muito satisfatório já que a modelagem provoca uma avaliação do que se faz e uma reorganização surge como resposta ao desafio.

Grupo 8 – Edward Condon

- He_2 não se forma, devido a elétrons livres formando um orbital anti-ligante.
- H_2 não possui elétrons formando um orbital anti-ligante

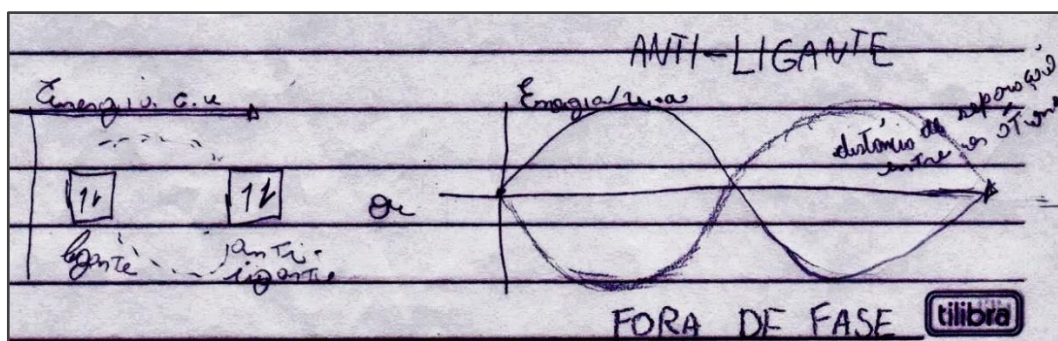


Figura 66 - Representação gráfica para a molécula di-hélio do Grupo 8 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

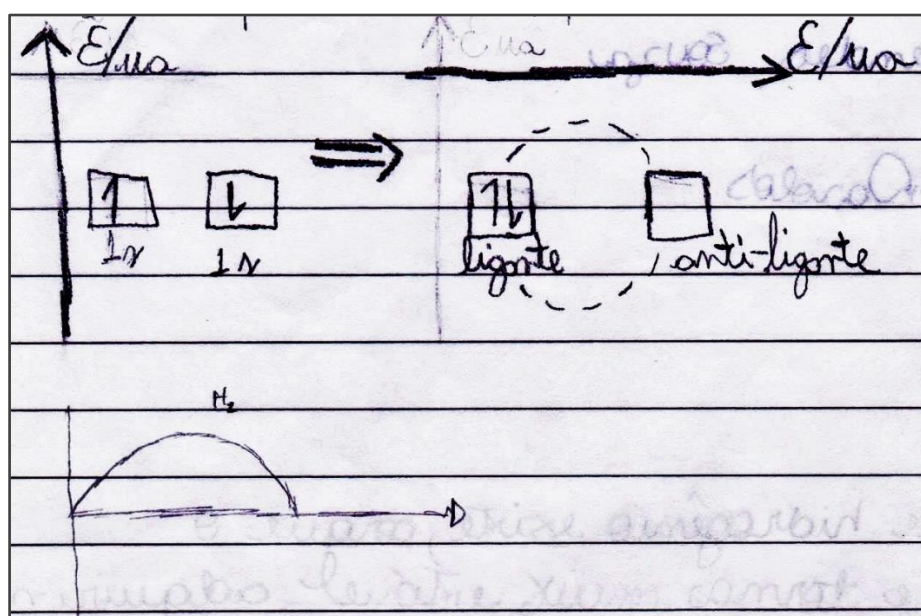


Figura 67 - Representação gráfica para a molécula di-hidrogênio do Grupo 8 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

A equipe remodelou o que havia feito anteriormente e utilizou o modelo da TOM para concluir a atividade. Após a percepção por um dos seus membros que alguns gases nobres faziam ligação química, o grupo voltou a sua atenção para a TOM e percebeu o preenchimento dos orbitais moleculares como fonte do problema. Além disso, associaram a interferência de ondas do tipo destrutiva com o orbital molecular antiligante por meio de um gráfico (**Figura**

66). Nisso, o grupo indica entender que o orbital é uma manifestação de uma função de onda e, como tal, a mesma possui uma fase que pode coincidir de forma construtiva ou destrutiva com outra função de onda. Portanto, a equipe demonstrou avanço por entre os modelos, estimulando com que todos pensassem em como os modelos mais antigos poderiam não ser suficientes para responder amplamente à questão. A representação de um esboço do diagrama de orbital molecular para o H_2 se encontra na **Figura 67** e contribui para a percepção visual de que o orbital molecular antiligante não é ocupado, resultando na formação de uma ligação simples entre os hidrogênios.

Grupo 9 – Leland Allen

O grupo 9 alterou o modelo anterior com fundamento no compartilhamento de pares eletrônicos para o modelo da Teoria do Orbital Molecular (TOM) (**Figura 68**), em que são feitas as representações dos diagramas e o cálculo da ordem de ligação. Aparentemente, o grupo notou que a TOM permite tratar as duas situações de modo que distribuição eletrônica nos orbitais moleculares responda ao questionamento da existência.

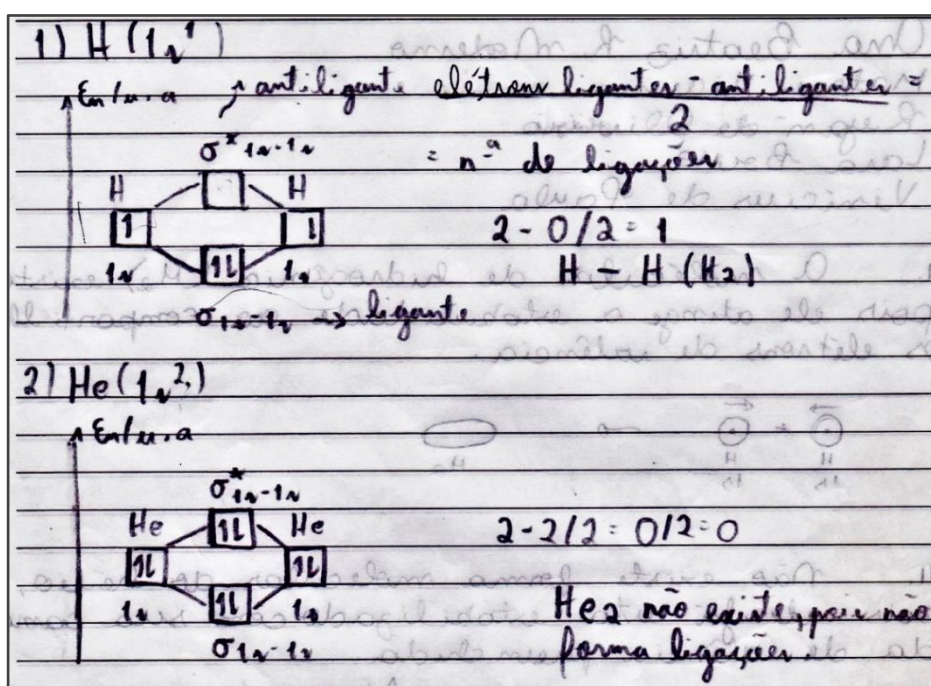


Figura 68 - Representação gráfica para as moléculas di-hidrogênio e di-hélio do Grupo 9 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

Grupo 10 – Erwin Schrödinger

Apesar da “regra do octeto” conseguir explicar para a grande maioria das moléculas e ligações, a suposta molécula “He₂” não ocorreria devido a mesma não haver ligação efetiva entre os átomos de hélio. Isso decorre porque os dois elétrons que se encontram no Orbital molecular anti-ligante cancelam com os outros dois elétrons presentes no Orbital molecular ligante.

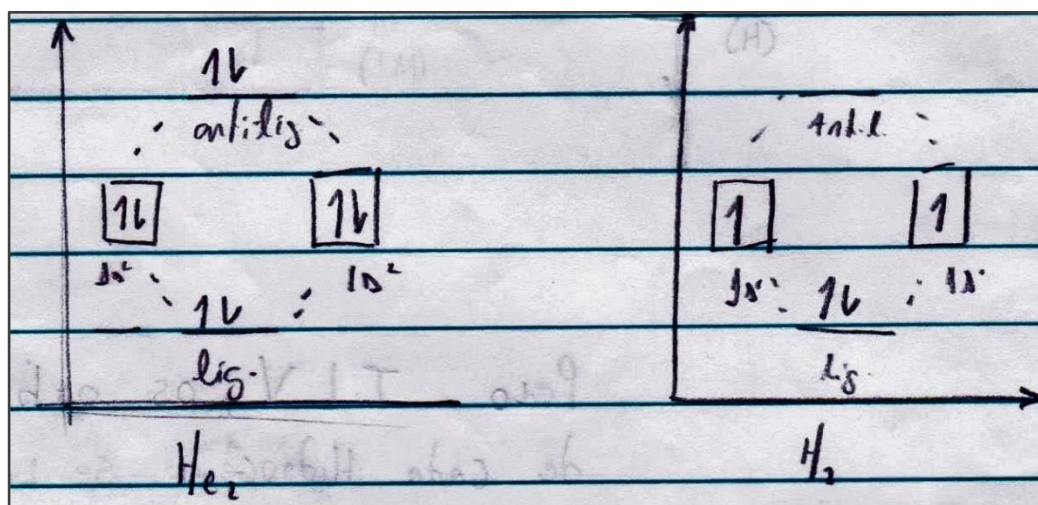


Figura 69 - Representação gráfica para a molécula de di-hélio e di-hidrogênio do Grupo 10 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

E através do cálculo da ordem de ligação de uma molécula que se utiliza para calcular o nº de elétrons presentes para com OM's $[(\text{n}^\circ \text{ de elétrons nos OM's ligante}) - (\text{n}^\circ \text{ de elétrons nos OM's antiligante})/2.]$

A equipe entendeu que a regra do octeto possui as suas exceções como pôde ser visto na comparação do hélio com outros gases nobres. Esse é um ponto importante, pois a regra do octeto é muitas vezes interpretada como uma lei, se estabelecendo como um obstáculo ao conhecimento científico. Nessa segunda etapa, ilustraram um diagrama de orbital molecular para H₂ e He₂ e calcularam a ordem de ligação, concluindo que o resultado nulo indica que não há formação de ligação – (**Figura 69**).

Grupo 11 – Friederick Hund

O nosso grupo desidiu manter a representação gráfica demonstrada na aula passada pois quando observamos o modelo por TOM ele está aplicado corretamente.

Já na representação do He encontramos um erro na representação na quantidade de prótons e elétrons.

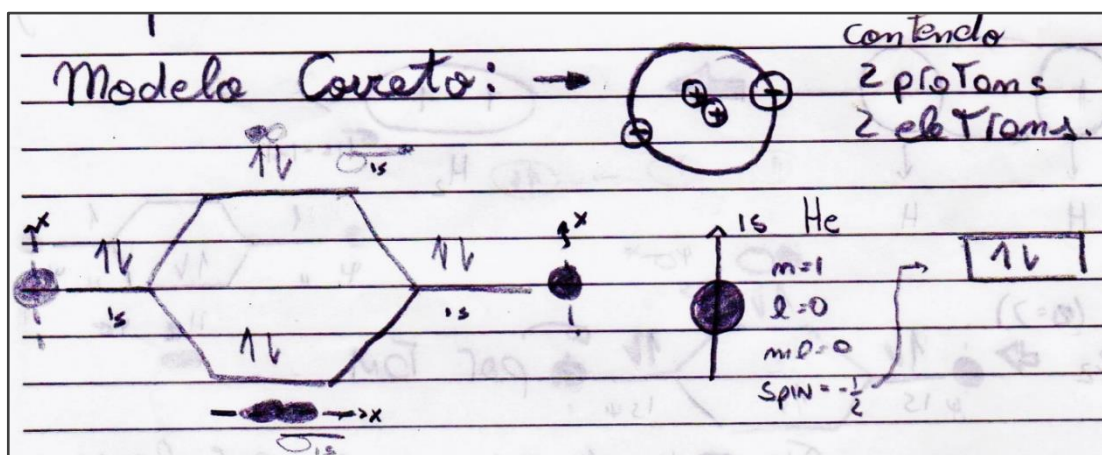


Figura 70 - Representação gráfica corrigida para o hélio do Grupo 11 – segundo modelo.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo optou por permanecer em seu modelo, alterando apenas a representação do átomo de hélio com 2 prótons e 2 elétrons como mostra a **Figura 70**. Para eles a TOM é um modelo capaz de explicar ambos os casos.

Reflexão final

A atividade fomentou as discussões em sala. Desafiados por uma suposta molécula aparentemente simples, os grupos recorreram, inicialmente, à clássica regra do octeto. Outros buscaram o caminho da TLV aplicando-a para o hidrogênio, entretanto usaram a estabilidade vinculado ao preenchimento completo da camada de valência para o hélio. A percepção de uso da TLV para o hélio esbarrava na estabilidade e na ausência de um orbital antiligante. E agora após a socialização?

A grande maioria (9 dos 11 grupos), conseguiu utilizar a TOM como modelo que abarca orbitais ligantes e antiligantes, obtendo uma ordem de ligação nula. Foi a partir da pergunta do colega sobre outros gases nobres realizarem ligações que houve um impulso muito maior de

como manejar os modelos. Se os gases nobres não são nobres, assim qual modelo se adapta melhor ao fato?

Nesse segmento, se observou uma tentativa de construção dos diagramas. Com isso, o preenchimento dos orbitais moleculares foi emergindo e indicando um igual preenchimento do nível mais baixo e alto em energia. Dessa maneira, os estudantes notaram que havia algo a mais em relação as outras teorias. O modelar como ação se encontra ali nas tentativas, nos esboços e questionamentos. Já que não viram firmamento constante nas outras teorias, avançaram sobre aquela que lhes permitiria falar do He_2 de forma mais completa. Por meio da TOM também foi possível abordar o número de elétrons em cada orbital, algo que surgiu como dúvida em alguns grupos. Apenas 2 equipes não conseguiram se desvencilhar da estabilidade ímpar dos gases nobres permanecendo em seus modelos anteriores.

6.1.3 Transcrições e comentários: situação do paramagnetismo e diamagnetismo

A segunda atividade de modelagem relaciona-se com o paramagnetismo e o diamagnetismo das moléculas de nitrogênio e oxigênio. A atividade consiste na construção de modelos com base em informações experimentais, sendo desenvolvida em equipes com 4 – 5 integrantes. Para esta atividade não constam os grupos 7 e 11, John Lennard-Jones e Friederick Hund, respectivamente, por conta das ausências dos alunos.

Inicialmente, algumas informações acerca de um experimento foram repassadas aos alunos, como consta abaixo:

“Na escola, Marie teve à sua disposição os seguintes materiais:

- Prato;
- Água;
- Detergente;
- Canudo;
- Ímã;

Marie colocou um pouco de água e detergente no prato. Em seguida, usou o canudo para formar uma bolha de ar na água com detergente e aproximou um ímã.”

Desse enredo, os grupos foram questionados sobre o que deveria vir a acontecer com a bolha perante a aproximação do ímã a partir de um modelo que poderia ser um desenho, um texto ou uma combinação desses para que em sequência socializassem o que haviam planejado. Assim, a pergunta pretendia que eles utilizassem o conhecimento das teorias de ligação química para modelar a situação que seria ampliada posteriormente. Desse modo, o questionamento assumiu a forma: *De posse dessas informações e do conhecimento químico acerca das teorias de ligação química, proponha um modelo que prediga se houve ou não interação entre a bolha de ar e o ímã.*

Com esse questionamento, os alunos podem modelar a situação descrita usando o conhecimento que possuem das teorias de ligação química para análise das moléculas frente a exposição de um campo magnético. Feitos os modelos mentais e discutidos entre os membros de cada grupo, a expressão se dá em papel. Após essa primeira modelagem e a socialização com a sala do pensamento de cada grupo, um vídeo* foi exibido para contar o que se espera que

* Acesso disponível em <https://www.youtube.com/watch?v=goj0hVu2cAk&t=27s>.

aconteça com a bolha de ar com a aproximação do ímã. Esse não atrai a bolha devido ao diamagnetismo do gás nitrogênio. Por conta do diamagnetismo o nitrogênio é repelido por um forte campo magnético algo que só pôde ser explicado através da TOM. A TOM, mediante os diagramas de orbitais moleculares, orienta como se dá a organização dos elétrons nos OM's. Quando os elétrons ocupam o orbital HOMO de forma desemparelhada, se promove o comportamento diamagnético daquela espécie que na presença de um campo magnético externo manifesta repulsão. Entretanto, quando há o emparelhamento de elétrons no HOMO, se tem o paramagnetismo, em que há atração do material perante um campo magnético externo.

Como o $N_{2(g)}$ apresenta elétrons desemparelhados no orbital HOMO a espécie é classificada como diamagnética. Logo, a bolha de ar expressa o comportamento desse constituinte majoritário. E quanto a uma bolha de $O_{2(g)}$?

Na animação é mostrada uma reação química em laboratório com o uso dos reagentes peróxido de hidrogênio, permanganato de potássio e água em kitassato. O peróxido de hidrogênio é diluído em água em um béquer e é transferido ao kitassato em que o permanganato é adicionado em sequência, resultando em uma reação bastante exotérmica. Após, o frasco é tampado e o gás oxigênio gerado pela reação flui pela saída lateral conectada a uma mangueira. Essa mangueira, por sua vez, é posicionada sob a superfície de água com detergente em uma bacia plástica. O O_2 gasoso forma bolhas na água que são atraídas na presença de um ímã de neodímio. Logo, o comportamento do oxigênio indica que a entidade é paramagnética, ou seja, é atraída na presença de um campo magnético externo.

Por meio do vídeo os estudantes observam o que acontece com as bolhas de oxigênio puro e é requisitado que expliquem o motivo disso ocorrer, fazendo que com que retornem ao modelo do $N_{2(g)}$ e amplifiquem para o $O_{2(g)}$. Abaixo seguem as transcrições de cada equipe seguidas por interpretação do pesquisador. Cada grupo foi identificado de modo a remeter a um cientista vinculado ao desenvolvimento da TOM para garantir o anonimato dos participantes da pesquisa. Ao todo, participaram 35 estudantes da turma de Bacharelado em Química nessa atividade. Os participantes foram divididos em grupos com 4 – 5 integrantes, conforme suas afinidades.

Abaixo encontram-se as transcrições dos modelos expressos pelos grupos para as atividades de modelagem acerca da dinâmica do diamagnetismo e paramagnetismo junto a Teoria do Orbital Molecular (TOM). As transcrições se encontram em estilo *itálico* e contam com as imagens das representações gráficas construídas pelos estudantes.

Grupo 1 – Gilbert Lewis

A reação entre detergente e água há a formação de íons. Acreditamos que essa ligação seja relacionada a uma interação eletrostática entre íon e ímã, já que os íons possuem cargas elétricas positivas ou negativas, enquanto os ímãs geralmente são eletricamente neutros. As forças surgem devido à atração e repulsão entre cargas elétricas.

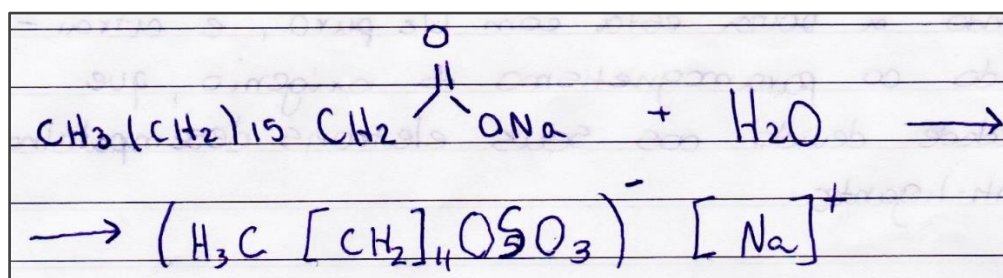


Figura 71 - Representação gráfica da situação detergente-água do Grupo 1.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo valorizou o detergente em água, indo para o caminho de compostos comumente presentes na formulação de materiais de limpeza, como é o caso do estearato de sódio, exemplificando essa situação por meio da **Figura 71**. Indo por esse caminho, assumiram que era estabelecida uma interação eletrostática entre o ímã e os íons presentes no tensoativo e que isso geraria uma ligação. Interações e ligação não significam a mesma coisa. A interação promovida por um ímã é de ordem magnética em que corpos com cargas em movimento podem responder de formas diferentes a esse estímulo. Essas formas são o que se chama de paramagnetismo e diamagnetismo. Os átomos, com cargas positivas e negativas, são como mini ímãs, pois cargas elétricas em movimento geram campo magnético. Consequentemente, o campo magnético é fruto de um campo elétrico em movimento. Não há formação de orbitais moleculares que justifique a constituição da ligação química entre ímã e detergente, mas há um campo que fomenta as interações de ordem magnética. Nesse caso, isso se dá entre o ímã e os gases presentes na bolha. O ímã, formado por átomos, pode ser cortado em inúmeras partes e ainda assim manterá um polo norte e um polo sul capaz de alinhar os domínios magnéticos de outros materiais.

A equipe considera as cargas elétricas no seu modelo, mas não relaciona com o magnetismo. Ao falar de eletrostática se toma as cargas em repouso, com fenômenos de atração

e repulsão entre cargas, esquecendo-se do movimento e do campo gerado pelo ímã e pelos elétrons.

Grupo 2 – Linus Pauling

Os gases que estão presentes no ar possui ligações muito fortes, com uma energia de ionização muito alta, por isso, não conseguem realizar ligações químicas com o material metálico em questão. Caso contrário, materiais metálicos estariam interagindo constantemente com o ar.

Aqui se encontra, novamente, a questão da ligação química entre um ímã e os gases do ar. Nesse modelo o grupo enfatizou que não haveria formação de ligação química – o que está correto – mas, de uma maneira que proporciona a sensação ao leitor que isso seria possível se os gases possuíssem baixas energias de ionização. O grupo não cita quais são os gases que consideraram fazer parte da bolha, mas afirmam que possuem energia de ionização muita alta e que realizam ligações. Pois bem, o gás nitrogênio se encontra na forma diatômica de maneira que a tripla ligação entre os átomos possua uma energia de dissociação equivalente a 945 kJ. mol^{-1} , valor considerado alto e responsável pela inércia desse gás. O O_2 , segundo maior componente da atmosfera, apresenta 497 kJ. mol^{-1} como energia de dissociação. Nitrogênio e oxigênio possuem as primeiras energias de ionização relativamente altas e costumam formar compostos de caráter predominantemente covalente. E, caso se considere os traços de gases como argônio e hélio na atmosfera, esses se encontram em forma monoatômica. Portanto, a ligação metálica não é condizente com a situação. O campo magnético exercido pelo ímã, novamente, passou despercebido enquanto uma suposta ligação gás-ímã ganhou ênfase na discussão. Além disso, materiais metálicos como o ferro podem interagir com o ar sofrendo processo de corrosão.

Grupo 3 – Werner Heisenberg

Segundo a TOM, os orbitais dos átomos se combinam, e assim geram os orbitais moleculares, porém, considerando a interação íma-bolha, os orbitais não se combinarão, pois na bolha temos a ligação da água com o detergente (que contém ligações de hidrogênio, que são fortes) e dentro dela possuímos o ar, composto de gases como O_2 , CO_2 , N_2 , e o N_2 , por exemplo, possui ordem de ligação 3, que é muito estável e forte, portanto o ímã não consegue interagir com a bolha.

A equipe levantou pontos relevantes pra discussão. Eles lembraram que a ligação química depende da combinação de orbitais resultando em orbitais moleculares, porém colocaram que isso não é possível no caso ímã-bolha. A isso se deve a ligação entre a água e o detergente – mencionada pelo grupo como ligações de hidrogênio. As ligações de hidrogênio são interações intermoleculares presentes de uma molécula para com a molécula vizinha por meio de átomos de hidrogênio ligados a átomos bastante eletronegativos, sendo eles o flúor, oxigênio e nitrogênio em interação com os pares de elétrons isolados desses mesmos elementos presentes em outra molécula. Assim, ligação de hidrogênio não significa ligação química, mas um tipo de interação intermolecular que envolve o elemento hidrogênio. Essa confusão entre ligação e interação, que pode ser potencializada pelo próprio nome, não é incomum conforme visto em literatura, como nas obras de Mendonça, Justi e Oliveira (2006) e em Junqueira (2017).

Grupo 4 – Fritz Heitler

1. Chegamos à conclusão de que a bolha de sabão não vai ser atraída pelo ímã pois o detergente age como uma película impedindo a interação ímã e elétrons.

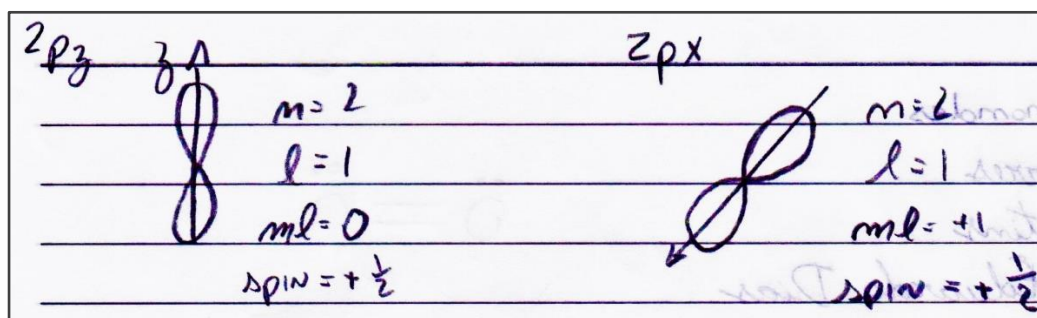
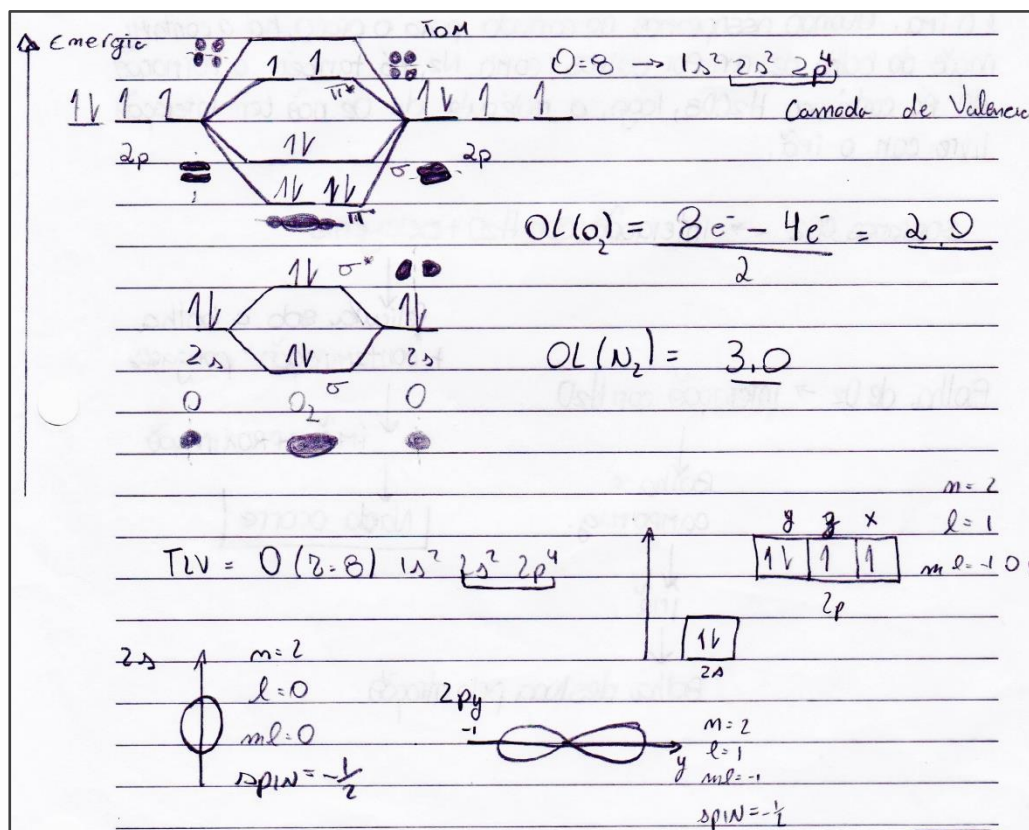


Figura 72 - Representação gráfica para a discussão do di-oxigênio do Grupo 4.

Fonte: Dados da pesquisa.

A conclusão está correta, porém isso não se deve a algum impedimento da interação entre o ímã e os elétrons dos gases presentes no ar atmosférico, mas ao diamagnetismo do N_2 que compõem de forma majoritária a composição do ar. Além disso, o grupo fez um esboço do diagrama de orbitais moleculares para o di-oxigênio junto com o cálculo da ordem de ligação

para essa espécie e o dinitrogênio conforme a **Figura 72** que conta ainda com representações dos orbitais p. Os participantes demonstraram terem compreendido a construção dos diagramas e a identificação de orbitais, porém não souberam usar a TOM para observar as diferenças entre N_2 e O_2 .

Grupo 5 – Robert Mulliken

Conclui-se que a bolha será levemente atraída pelo campo magnético do ímã, pois o oxigênio teria 2 elétrons no antiligante que enfraqueceria a ligação que faria com que oxigênio tivesse interação com o campo magnético.

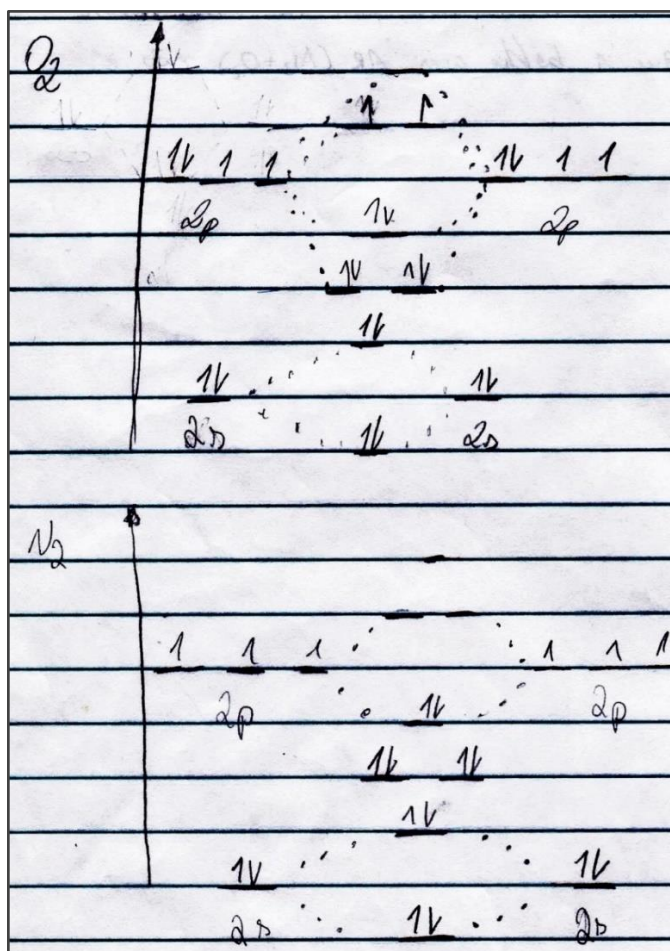


Figura 73 - Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O_2 e N_2 do Grupo

5.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo 5 focou nos gases presentes na bolha esboçando o diagrama de orbitais moleculares para o O_2 e o N_2 , constituintes majoritários do ar atmosférico como exibe a **Figura 73**. Levando em consideração esses dois gases, o grupo pontuou que a bolha de ar seria fracamente atraída pelo ímã, pois o oxigênio ainda teria interação com o campo magnético. Essa interação, segundo o grupo, se deve ao enfraquecimento da ligação oxigênio-oxigênio por possuir elétrons em orbitais moleculares antiligantes. É interessante notar que o grupo analisou a constituição do ar e usou do conhecimento dos diagramas para estudar as duas moléculas diatômicas homonucleares. A fraca atração se dá em decorrência da presença do O_2 , algo muito bem discutido em grupo. O grupo observou, por meio do estudo dos diagramas, a ocupação do OM antiligante no O_2 . Essa ocupação representa um enfraquecimento da ligação química entre os átomos de oxigênio, porém não é a ocupação de um OM antiligante que promove atração ou repulsão. O que ocorre é que os elétrons se encontram desemparelhados em um orbital HOMO – que poderia ser ligante ou antiligante – impulsionando um domínio magnético susceptível ao campo de atração – caso de uma bolha feita de O_2 .

Grupo 6 – Fritz London

1. Repele, pois os elétrons da ligação do gás carbônico repelem os elétrons do ímã.

Após discutirmos a estabilidade da molécula pelo modelo de TOM, não ocorrerá repulsão nem atração entre o ímã e a bolha, já que todos os elétrons estão estáveis na ligação covalente.

O relato da equipe 6 demonstra que consideraram o gás carbônico como o constituinte principal da bolha, mas não chegaram a um consenso sobre a repulsão conforme a contradição do “repele” citado inicialmente e depois do “não ocorrerá repulsão nem atração”. Considerando a interação entre as cargas eletrônicas, os alunos optaram pela repulsão, porém se nota uma grande dúvida quando colocam que os elétrons estão estáveis em ligação covalente. A estabilidade diz respeito a ligação covalente, mas justamente pela molécula ser formada por átomos e esses por cargas elétricas em movimento que há respostas de atração ou repulsão. Assim, a estabilidade mencionada pelo grupo não avalia o movimento eletrônico e induz a uma ideia de estabilidade equivalente a estática. O gás carbônico foi ponderado em função de ser um componente liberado na expiração do ar pelo corpo humano. O homem também expira o N_2 que não participa de uma reação no organismo durante o processo respiratório ao invés do CO_2 que é um produto do metabolismo. Logo, o N_2 inspirado é expirado, compondo a bolha da

Grupo 9 – Leland Allen

Espera-se que a bolha seja repelida, devido a polaridade do ar. Essa polaridade é dada principalmente pelo gás oxigênio, que possui dois elétrons nos orbitais anti-ligantes, causando a alta polarização da molécula, aumentando as interações magnéticas.

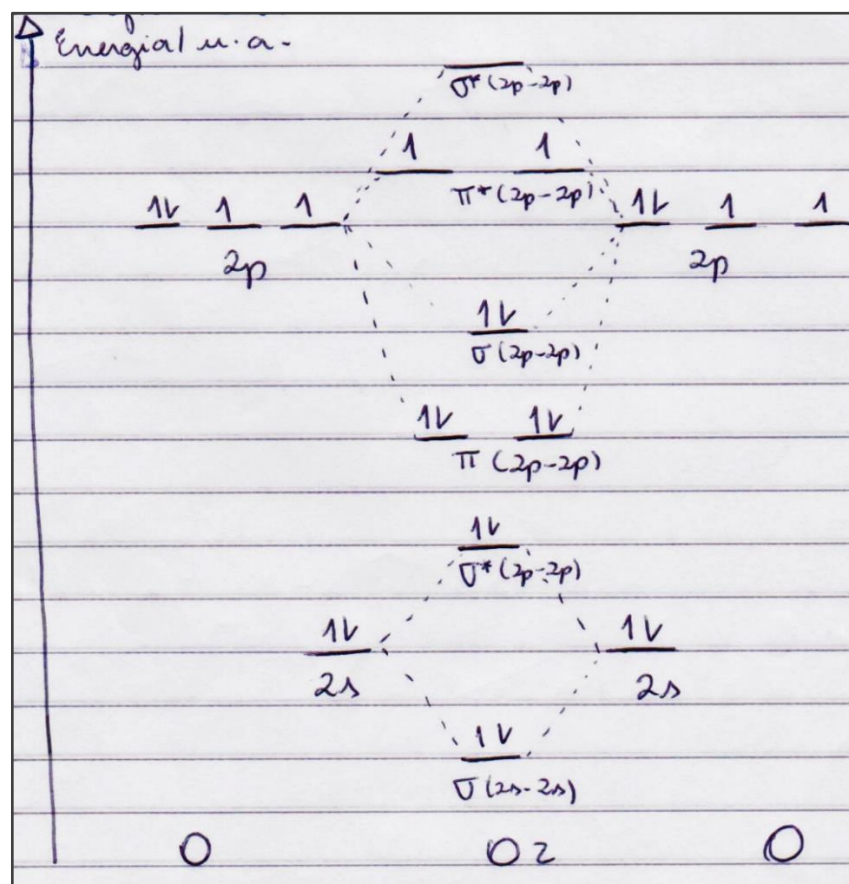


Figura 75 - Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O₂ do Grupo 9.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo não deixa claro se há predomínio de repulsão ou de atração ao longo do modelo, porém identificam os dois elétrons desemparelhados no gás O₂ através do esboço do diagrama de orbitais moleculares (**Figura 75**) e usam disso na sua exposição. Para eles, são esses elétrons que promovem uma “alta polarização da molécula”. A polaridade se manifesta por meio das diferenças de eletronegatividade dos átomos, gerando densidades de carga positiva e negativa em uma molécula. Para o O₂, o momento de dipolo resultante é equivalente a zero já que os dois átomos que a compõem são da mesma natureza. O mesmo é válido para o N₂, não sendo a polaridade o motivo específico da repulsão ou da fraca atração da primeira bolha pelo ímã.

Logo, o termo polaridade é incoerente com essas moléculas apolares. Percebe-se que o grupo confunde o que vem a ser polaridade com a resposta paramagnética do O_2 associando polaridade com elétrons desemparelhados.

Grupo 10 – Erwin Schrödinger

1º modelo - A bolha é composta por vários gases da atmosfera como o Nitrogênio, e como o nitrogênio tem os seus elétrons emparelhados no orbitais 2p ele não cria um campo magnético significativo para interagir com o do ímã.

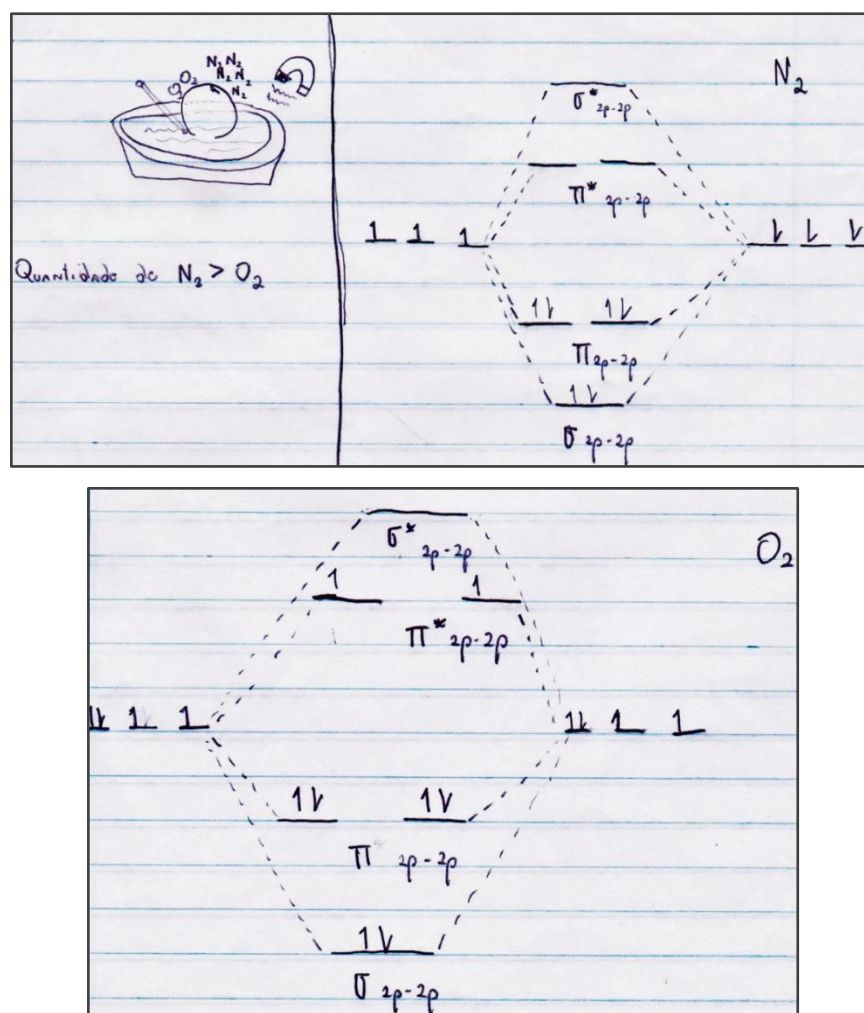


Figura 76 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O_2 e N_2 do Grupo

10.

Fonte: Dados da pesquisa.

A equipe é objetiva ao avaliar o diagrama de orbitais moleculares para o N_2 esboçado por meio da **Figura 76**, concluindo que não há interação com o ímã. O diamagnetismo do nitrogênio advém do alinhamento invertido dos domínios magnéticos frente ao campo magnético que é colaborado pelo emparelhamento dos elétrons em orbital HOMO. Quando a equipe menciona que nele não há criação de um campo magnético significativo cabe a observação de que elétrons em movimento geram campo magnético, porém o alinhamento dos domínios magnéticos do N_2 reforça a repulsão. A comparação feita entre os diagramas de orbitais moleculares das espécies N_2 e O_2 permitiu à eles a observação dos elétrons emparelhados no di-nitrogênio e desemparelhados no di-oxigênio.

Reflexão geral – Primeiro momento

Nessa primeira etapa percebe-se que parte dos grupos adotou uma linha de pensamento voltada a ligação química, propriamente dita, entre ímã e bolha. Sabe-se que não há o estabelecimento dessa ligação, mas que há uma interação gerada pelo campo magnético do ímã em relação aos domínios magnéticos do material – nesse caso, a bolha. Quando a sequência didática foi elaborada tratando as teorias de ligação química como modelos científicos se priorizou a diferenciação desses no tratamento dado a ligação, aos fenômenos e as relações que podem ser atingidas junto às propriedades periódicas. Por conta disso, a atividade acompanha um questionamento que transaciona nas teorias de ligação. Pensando na ideia original de ligação química como compartilhamento de par eletrônico, como explicar os gases nitrogênio e oxigênio serem divergentes quanto à aproximação de um campo magnético externo? Ambas as espécies são insaturadas e possuem pares de elétrons isolados. E usando a TLV? Como explicar o paramagnetismo de uma espécie com a camada de valência em 2s e 2p, assim como o N_2 diamagnético? O que há de tão diferente na sobreposição de orbitais para essas espécies? Ou a TLV tem como limitação o tratamento firmado em orbitais ligantes, ignorando os antiligantes?

Em busca dessas respostas, a TOM se mostra como um modelo científico alternativo que atende a angústia do fenômeno. Aludindo a ligação química como resultado da distribuição de elétrons pelos orbitais moleculares, a TOM sobressai as outras teorias por se desvincular da ligação como par eletrônico. Ademais, os níveis de energia dos orbitais são amplamente explorados, considerando não somente os orbitais moleculares ligantes, mas os antiligantes e não ligantes. O estudo da distribuição eletrônica por entre os orbitais moleculares, segundo o nível de energia, permite a clara visualização de elétrons desemparelhados no orbital HOMO para o gás oxigênio. Portanto, há uma diferença fundamental entre esse diagrama quando

comparado ao do $N_{2(g)}$. Sabendo do magnetismo gerado por elétrons em movimento, os materiais podem responder a um campo externo de maneira atrativa ou resistente a atração. Como o gás oxigênio possui elétrons desemparelhados, o rearranjo dos domínios magnéticos em uma orientação é beneficiado.

Portanto, ao serem questionados quanto ao conhecimento das teorias de ligação química nessa tarefa, não se esperava uma resposta pronta descaracterizando o ideal da modelagem. Mas, se almejava o manejo com as teorias, a comparação dessas e dos diagramas, levantando conclusões. Alguns grupos caminharam por esse segmento, seja discutindo sobre como deveria ser um diagrama de orbitais moleculares da água ou como o detergente poderia impedir uma atração magnética atuando como película ou ainda utilizando os íons dos seus constituintes. Outros focaram no estabelecimento de ligação entre ímã e bolha, algo que não ocorre. Isso demonstra um equívoco na forma como os alunos entendem ligação e interação.

A interação surgiu em dois momentos principais: interação ímã-bolha e ligações de hidrogênio. Alguns alunos trataram uma interação de campo magnético com material como ligação, demonstrando desconhecer a atuação do campo e a relação com cargas elétricas. Outros tomaram as ligações de hidrogênio entre solvente e detergente como ligações estabelecidas. O termo “ligações” para uma interação intermolecular pode ter impulsionado um obstáculo ao significado científico, como sugerem algumas respostas. À vista disso, a relação ligação – ímã ganhou ênfase na discussão, embora questionada por eles próprios por não a observarem no dia a dia.

A própria discussão do constituinte presente na bolha de ar foi um evento à parte. Desde ácido carbônico a N_2 , passando algumas vezes por CO_2 . Os discentes se envolveram na discussão de quem interagiria com o ímã. Pensando na expiração, o gás carbônico foi bastante mencionado por entre os grupos, sendo questionado na socialização. Se nas aulas de biologia o oxigênio é inspirado e o gás carbônico é expirado, o que ocorre com o nitrogênio?

Já outros dois grupos partiram diretamente da TOM. Um deles questionava como deveria ser um diagrama para a água, pensando na interação dessa com o ar, mas já pensando nos gases da bolha conjuntamente. Conversando com o grupo foi explicado que os diagramas para moléculas poliatômicas ainda não seriam abordados devido à complexidade do assunto para tal semestre. Recalculando a rota, a equipe focou nos gases e desenvolveu as comparações por TOM. O outro grupo, desde o início abordou a TOM pela lembrança do oxigênio em uma aula de TLV, na qual, as limitações da teoria foram citadas. Empregando a lembrança da aula junto aos diagramas, conseguiram perceber o centro da questão.

De forma geral, as discussões foram bastante proveitosas e movimentaram os alunos quanto às relações a serem feitas com o conhecimento que possuem, sendo esse trabalhado ao longo de todas as aulas de maneira a possibilitar o domínio do conhecimento científico. Com isso, a primeira etapa de modelagem foi concluída. Na socialização, as discussões de ligação *versus* interação foram explicitadas para que não houvesse a permanência desse obstáculo epistemológico. Quanto a composição da bolha, os alunos puderam observar o que cada colega havia pensado, podendo repensar seu modelo para a próxima etapa. Em sequência à socialização, um vídeo sobre o comportamento dos gases dinitrogênio e di-oxigênio foi exibido aos alunos. O vídeo[†], gravado para fins didáticos nas dependências do Instituto de Química, mostrou a produção do gás O_2 a partir de água, peróxido de hidrogênio e permanganato de potássio. As bolhas geradas em água pelo gás foram atraídas por um ímã.

Remodelando

Grupo 1 – Gilbert Lewis

Concluimos que quando a bolha está com O_2 puro, e atraída pelo ímã devido ao paramagnetismo do oxigênio, que tem essa propriedade devido aos seus elétrons desemparelhados, nos orbitais anti-ligantes.

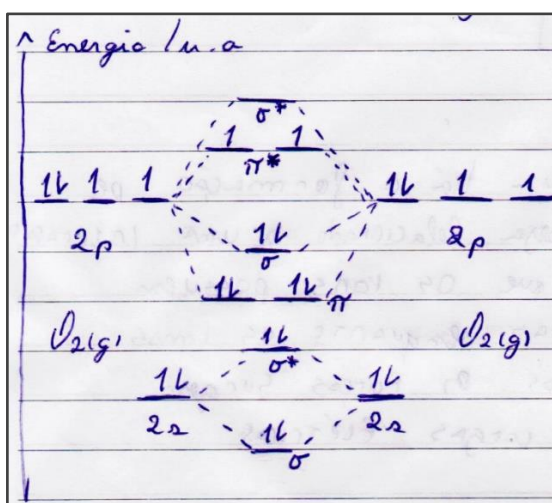


Figura 77 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O_2 do Grupo 1 – segundo momento.

Fonte: Dados da pesquisa.

[†] Acesso disponível em <https://www.youtube.com/watch?v=goj0hVu2cAk&t=27s>.

O grupo 1 alterou todo o modelo anterior. Saíram do foco da película de detergente para o gás oxigênio, ilustrando o diagrama de orbitais moleculares (**Figura 77**). Quando questionados sobre a mudança, transpareceram que isso ocorreu por conta dos outros grupos que utilizaram a TOM. Isso demonstra que não houve, a princípio, um claro entendimento da equipe sobre a situação. Eles consideraram vários parâmetros no seu primeiro modelo, mas o campo magnético passou despercebido, sendo sutilmente citado a partir de outros modelos. Consequentemente, a socialização é uma etapa relevante na modelagem, visto que, promove novos olhares sobre a limitação do seu próprio modelo. Em contrapartida, é essencial que o docente busque um fechamento que contemple as dúvidas surgidas.

Grupo 2 – Linus Pauling

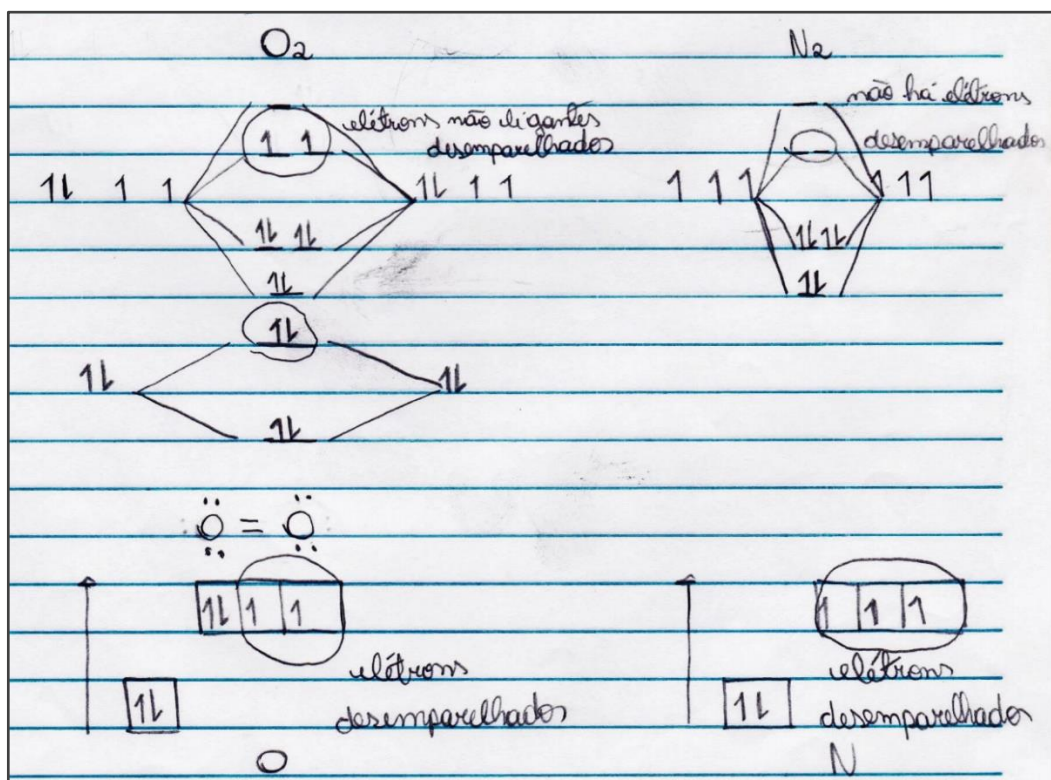


Figura 78 - Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O₂ e N₂ do Grupo

2.

Fonte: Dados da pesquisa.

Assim como o grupo 1, a equipe 2 alterou o modelo significativamente após a socialização do primeiro modelo. De uma discussão enraizada em uma suposta ligação dos gases atmosféricos com o ímã para os diagramas de orbitais moleculares com elétrons

emparelhados e desemparelhados conforme a **Figura 78**. A equipe percebeu que usando o modelo das caixinhas, tanto para o N_2 quanto para o O_2 , havia a indicação de elétrons desemparelhados que não justificam o comportamento oposto desses gases. Já nos diagramas, notaram a ausência de emparelhamento no orbital HOMO do N_2 .

Grupo 3 – Werner Heisenberg

Como a molécula de O_2 ($O=O$) possui elétrons desemparelhados e dentro da bolha existem muitas moléculas, então terão muitos pares de elétrons desemparelhados. Como o ímã cria um campo eletromagnético (atrai elétrons magneticamente), ele conseguirá atrair a bolha em consequência dos elétrons desemparelhados do O_2 .

Além disso a molécula de O_2 possui orbitais p antiligantes ocupados por elétrons, segundo a TOM.

A equipe percebeu que não é feita uma ligação química propriamente dita, mas que surge uma interação entre bolha de oxigênio e ímã devido a atração do campo magnético. A partir da socialização, perceberam que a TOM possibilita a visualização de elétrons desemparelhados e que esses se orientam de acordo com o campo. Em um primeiro momento não fica claro se eles compreenderam que os elétrons desemparelhados são justamente aqueles que aparecem nos orbitais p antiligantes pela maneira como apresentaram. Caso ilustrassem o diagrama, como fez o grupo anterior, isso se tornaria mais visível. Ademais, o emparelhamento dos elétrons não é restrito a orbital antiligante ou ligante. A apropriação dos termos HOMO e LUMO colaboram nessa redação e não aparecem nas respostas. Aqui o grupo poderia ter mencionado que os elétrons desemparelhados se encontram no orbital molecular HOMO.

Grupo 4 – Walter Heitler

A molécula de O_2 pura, sem outros gases interferindo, proporciona a atração eletromagnética entre os e^- e o campo magnético do O_2 e o ímã. Quando assopramos no canudo para o prato, há a contaminação da bolha de ar por outros, como N_2 , há também a formação do ác. Carbônico H_2CO_3 , logo, a molécula de O_2 não tem interação livre com o ímã.

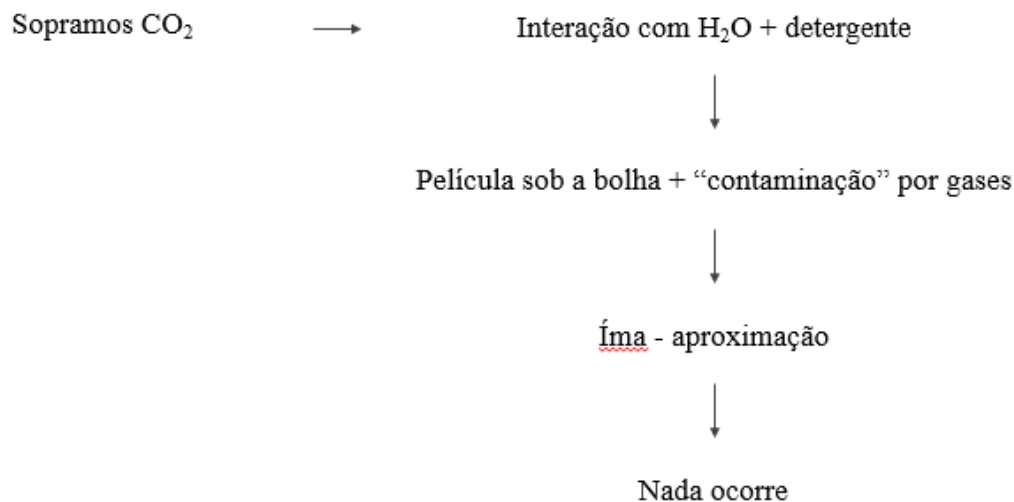


Figura 79 - Representação do esquema do Grupo 4 para a relação bolha de ar e ímã.

Fonte: Dados da pesquisa.

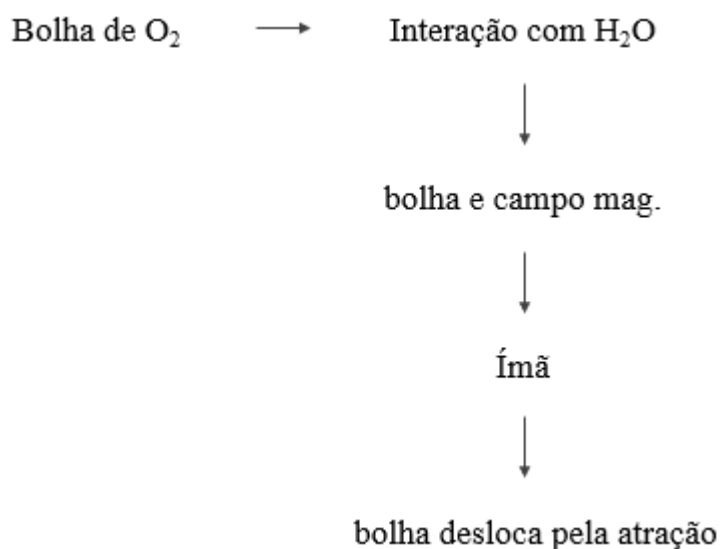


Figura 80 - Representação do esquema do Grupo 4 para a relação bolha de gás oxigênio e ímã.

Fonte: Dados da pesquisa.

Nos dois modelos a película formada pelo detergente aparece como um empecilho a atração do campo magnético. A equipe não justifica o motivo da atração da bolha de oxigênio, mas desenhou o diagrama de orbitais moleculares anteriormente, realizou cálculos de ordem de ligação para ambos e representou orbitais do tipo s e p. Assim, parece que há uma falta da conexão de todas essas ferramentas. Por que o cálculo da ordem de ligação? Como a

identificação dos orbitais auxilia a interpretação desse fenômeno? Quais informações são retiradas do diagrama? Sem uma conclusão conjunta dessas ideias, só há aplicação no formato das representações. A equipe considerou também que para a bolha de ar, com predominância de CO_2 , havia uma película de detergente que dificultava quaisquer interações com o ímã (**Figura 79**). Outrossim, consideraram que a presença do oxigênio estava em menor quantidade, o que está correto. Todavia, a problemática da película não foi exposta para o oxigênio (**Figura 80**). Conversando com o grupo, eles souberam apontar que o motivo estava nos elétrons desemparelhados e na quantidade de gás paramagnético presente na bolha.

Grupo 5 – Robert Mulliken

Conclui-se após os dados experimentais que a bolha que possui apenas oxigênio se atrai. Isso porque quando fazemos a comparação do TOM do N_2 e O_2 vemos que o O_2 possui 2 elétrons em 2 Orbitais Moleculares anti-ligantes, esses elétrons vão ser atraídos pelo campo magnético do ímã. No caso do N_2 ele não tem nenhum elétron desemparelhado o que significa que a bolha com ar ($\text{N}_2 + \text{O}_2$) não é atraído.

Essa equipe manteve a modelagem com base na TOM utilizando os mesmos diagramas já construídos na primeira etapa. Através da observação concluem que os elétrons desemparelhados do oxigênio são responsáveis pelo comportamento paramagnético da espécie. Desde o início trouxeram que havia uma atração de campo magnético por elétrons, seguindo um planejamento de estudo das moléculas com respaldo da TOM. Consequentemente, destrincharam a atividade de modo próximo da situação real, já que como modelo de ligação química a TOM é a mais apropriada para explicar porque algumas substâncias são atraídas e outras não sob influência de um campo magnético.

Grupo 6 – Fritz London

No ar há O_2 e N_2 (entre outros gases) fazendo com que a bolha não seja atraída, pois mesmo que o O_2 tenha e^- desemparelhados, o que causaria atração caso fosse apenas O_2 , o N_2 impede que isso ocorra já que ele não apresenta e^- desemparelhados os gases fazem com que haja atração com o ímã.

Como há $e^{-\ddagger}$ desemparelhados ocorre interação com o campo magnético do ímã, ocorrendo uma atração entre os dois.

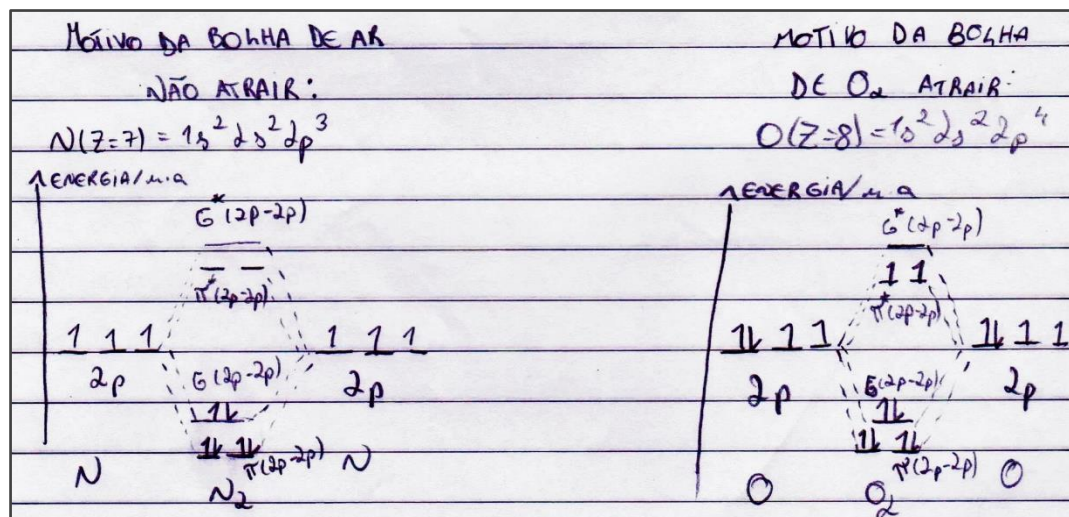


Figura 81 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de N_2 e O_2 do Grupo 6 – segundo momento.

Fonte: Dados da pesquisa.

Assim como outros colegas, o grupo 6 também mudou o modelo. Partindo dos diagramas como mostra a **Figura 81**, constataram que os elétrons desemparelhados do gás dióxigênio são responsáveis pelas diferentes respostas frente ao ímã.

Grupo 8 – Edward Condon

A bolha de ar é em grande maioria N_2 que não é atraído, pois não possui elétrons desemparelhados, segundo a TOM.

A bolha de O_2 puro é atraída pelo ímã, pois possui 2 elétrons desemparelhados no orbital molecular $\pi^*(2p-2p)$ de acordo com o diagrama:

[‡] **Nota:** e^{-} corresponde a elétrons.

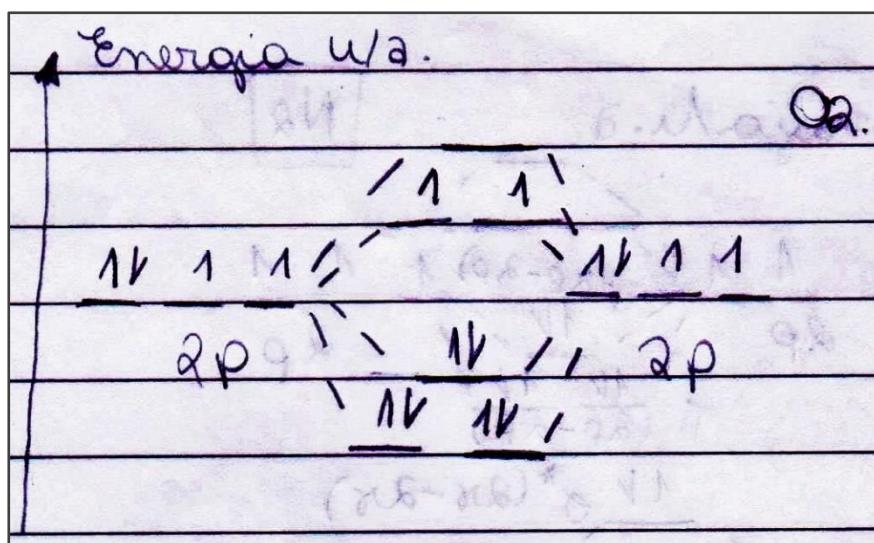


Figura 82 – Representação gráfica dos diagramas de orbitais moleculares de O_2 do Grupo 8 – segundo momento.

Fonte: Dados da pesquisa.

O grupo não alterou o modelo e seguiu da forma esperada pela TOM. Analisando de forma correta a composição da bolha junto a atração, separaram as moléculas diatômicas e construíram o diagrama de orbitais moleculares para o di-oxigênio (**Figura 82**), que contém o par de elétrons desemparelhados no orbital HOMO.

Grupo 9 – Leland Allen

A bolha de ar não atraiu, pois há, em maior parte, de gás nitrogênio (N_2), que não possui elétrons em orbitais anti-ligantes e é menos polar. Já a bolha de gás oxigênio (O_2) foi atraída por possuir elétrons nos orbitais anti-ligantes e ser mais polarizada (em relação ao N_2 , por exemplo).

Quando a equipe manifesta “elétrons em orbitais anti-ligantes” soa uma ênfase na condição do orbital ser antiligante, sendo citado que o N_2 não chega a ter seus orbitais moleculares desse tipo ocupados e, por isso, não há atração. Outro ponto que chama a atenção é a polaridade. Para a equipe o N_2 é menos polar que o O_2 por esse apresentar elétrons em orbitais antiligantes. Nisso há uma confusão: polaridade diz respeito ao momento magnético resultante na molécula, sendo ambas apolares. Tomando a molécula de oxigênio como um todo,

cada elétron se comporta como um pequeno ímã em que todos esses apontam em direções aleatórias. Consequentemente, não há um momento de dipolo resultante significativo para afirmar uma polaridade. Embora, na presença do campo magnético, há um certo alinhamento das direções produzindo o efeito visual de atração.

Grupo 10 – Erwin Schrödinger

O nitrogênio (N_2) por já ter seus orbitais moleculares preenchidos ele está completamente estável e logo não é atraído pelo ímã. Já o oxigênio (O_2) por semi-emparelhar orbitais antiligantes enfraquece sua estabilidade e gera um dipolo magnético que interage com o ímã, que pode ser visto no vídeo com a bolha de oxigênio puro.

Ao declarar que o preenchimento de orbitais antiligantes enfraquece a ligação o grupo traz uma importante contribuição da TOM para o entendimento de ligações e moléculas inexistentes (como foi o caso do He_2). Todavia, não é a ocupação de um orbital antiligante a responsável pelo paramagnetismo, mas a organização dos elétrons desemparelhados em orbitais HOMO capazes de fornecer um dipolo magnético residual ao ser induzido por um ímã. Com a orientação dos pequenos polos formados por elétrons frente ao campo magnético, surge a resposta de atração. A equipe soube trabalhar com a TOM desde o primeiro modelo, aprimorando a questão central da interação de elétrons com o ímã junto aos diagramas, cabendo a ressalva de que os elétrons desemparelhados nem sempre estarão em orbitais antiligantes, por isso que o uso da nomenclatura HOMO e LUMO simplifica e contextualiza objetivamente a ocupação do orbital molecular.

Reflexão geral – final

Após a socialização dos grupos, foi possível notar que todos se voltaram a TOM. Alguns permaneceram nessa teoria e outros mudaram bruscamente ao ver que o uso dos diagramas indicava diferença entre as espécies. Além disso, durante a exposição, os grupos que colocaram o gás nitrogênio explicaram a escolha com base na composição do ar. Já os grupos que partiram do gás carbônico, usaram a expiração desse composto pelo corpo como justificativa, sendo questionados do que viria a acontecer com o nitrogênio. A discussão como um todo foi válida já que confusões entre conceitos puderam ser diagnosticados, questionamentos quanto a natureza da matéria e ao experimento foram realizados junto a comparações entre teorias.

Acostumados com a simbologia da estrutura de traços, precisaram ampliar a visão microscópica para passar de uma situação a outra. Um empecilho da atividade foi o entendimento do campo magnético do ímã, visão essa debatida com base na socialização. Nesse contexto, a base do magnetismo fez falta à atividade já que aguçou a associação errônea da ligação com o ímã.

6.1.4 Categorias por análise de conteúdo

Categorias para o di-hidrogênio: primeira parte

Seguindo os passos de Bardin (2016) quanto à análise de conteúdo, busca-se verificar como os participantes da pesquisa avaliam a existência de uma molécula de hidrogênio e de hélio. A frequência junto a ausência de palavras e associações indicará, supostamente, acertos, dificuldades e obstáculos frente ao conhecimento científico.

Quando questionados sobre o hidrogênio não houve crença na inexistência da molécula H_2 em quaisquer momentos da atividade. Para a explicação de sua existência, alguns grupos recorreram ao compartilhamento de elétrons expresso pelo modelo de Lewis como fator relevante para a estabilidade da espécie H_2 e, conseqüentemente, a sua existência. O compartilhamento também foi expresso, algumas vezes, pela representação de traços e pontos. O compartilhamento de elétrons costuma trazer a mente que “o átomo precisa completar sua camada de valência”. Essa “necessidade” que remete a uma demanda humana, de caráter animalista ao átomo, conduz ao octeto completo. Não obstante, dois grupos trouxeram explicitamente que o compartilhamento de elétrons está vinculado com uma maior estabilidade por atingir o octeto. Como já discutido em literatura por Mortimer, Mol e Duarte (1994), o octeto assume um papel dogmático criado em torno da ligação química, dificultando um entendimento mais amplo do tema. Considerando que o compartilhamento de elétrons ao modo interpretado por Lewis em 1916 obteve expressão na atividade, percebe-se que há uma forte relação desse com a estabilidade que garante a formação da molécula.

A sobreposição de orbitais também surgiu como lembrança da Teoria da Ligação de Valência (TLV), seja por meio da escrita e/ou das representações gráficas. Apesar das interações entre as funções de onda se darem por forma construtiva e destrutiva, apenas um grupo entre os 5 presentes trouxe essa última. Desse modo, foi possível observar o surgimento de categorias com base em dois polos principais: a estabilidade e os aspectos fenomenológicos conforme a **Figura 83**. A ilustração está organizada de modo em que a partir da categoria principal da estabilidade foram vinculadas as categorias finais após a análise. A frequência com

a qual essas categorias foram encontradas nos modelos é expressa através do gráfico contido na **Figura 84**.

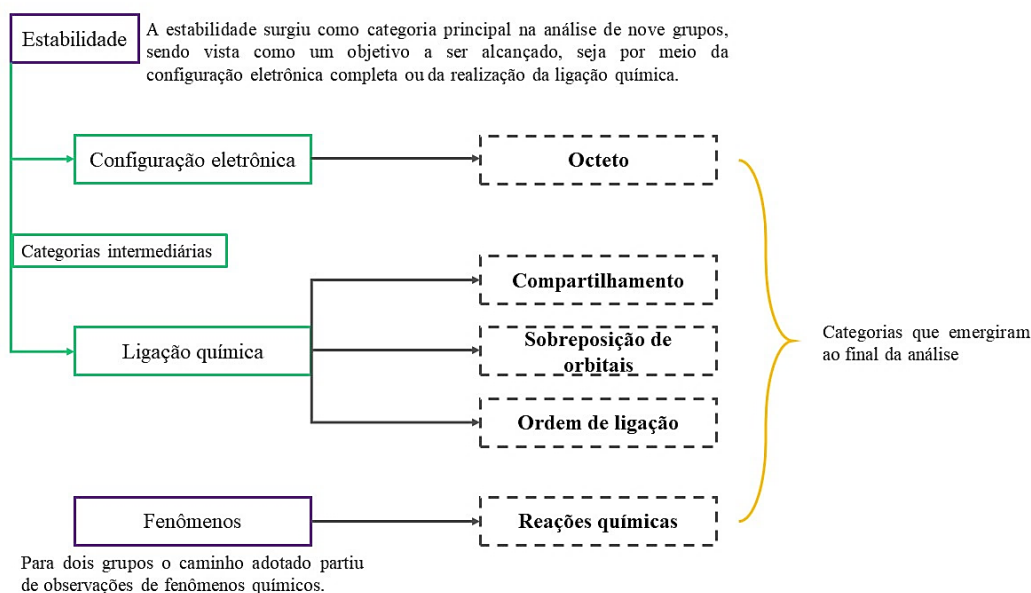


Figura 83 - Esquematização das categorias para o di-hidrogênio – primeiro modelo.

Fonte: Obra dos autores.

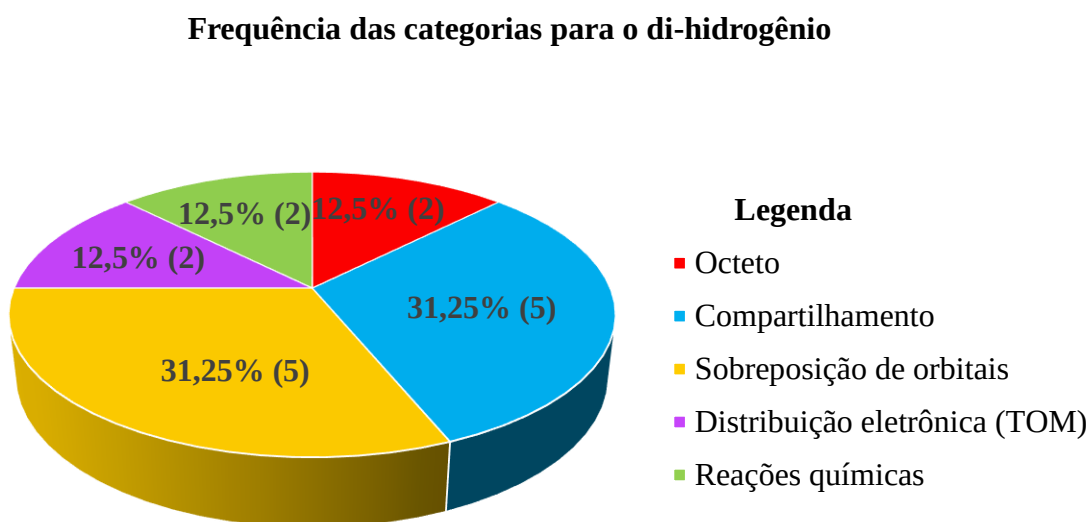


Figura 84 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hidrogênio – primeiro modelo.

Fonte: Obra dos autores.

Há uma coocorrência entre alguns elementos. A menção da regra do octeto surge vinculada à estabilidade. Os grupos relacionaram que para existir a estabilidade de uma espécie,

o octeto deveria ser contemplado o que sugere também a coocorrência do compartilhamento eletrônico.

A Teoria da Ligação de Valência (TLV) surge nas respostas com a sobreposição de orbitais em evidência. Sendo a molécula de di-hidrogênio o exemplo mais simples, todos os grupos que trouxeram a TLV optaram pela interação construtiva σ ($1s-1s$). Apenas um desses grupos considerou que há um orbital antiligante gerado pela interação destrutiva das funções de onda. A predominância da ausência desse aspecto sugere que há uma maior dificuldade de visualização da existência de orbitais antiligantes pela TLV o que foi observado ao longo da atividade. Essa dificuldade corrobora na comodidade do uso de um modelo de ligação química mais simples com base no octeto.

Por sua vez, a Teoria do Orbital Molecular (TOM) foi citada com menor frequência sendo mencionada em duas equipes (4 e 11). A equipe 4 usou a ordem de ligação como fator da existência e a sobreposição de orbitais por meio da Teoria da Ligação de Valência (TLV). Já a equipe 11 usou todas as teorias, reforçando um caminho de um modelo mais simples para outro mais complexo.

Distanciando-se dos modelos de ligação química, duas equipes recorreram a fenômenos químicos para tratar o assunto. Ambas exemplificaram alguma reação química com liberação de gás di-hidrogênio, correspondendo a um caráter fenomenológico em que há liberação de gás como evidência experimental. A fuga do uso de modelos para ligação química sugere que a equipe pode ter tido dificuldade em expressar o próprio conceito de ligação química em suas discussões. O uso de fatores experimentais, embora amplie de forma diferenciada o tratamento da questão induz a evidência fenomenológica em detrimento da teórica.

Categorias para o di-hélio: primeira parte

Para o hélio percebe-se que o avanço para modelos de ligação química mais completos teve maior dificuldade. Com base advinda do Ensino Médio de que gases nobres não participam de ligações químicas, vários estudantes optaram pela não existência da molécula He_2 . De fato, essa molécula não existe. Porém, é uma falácia classificar os gases nobres como elementos sem quaisquer participações em ligações, pois são conhecidos compostos com xenônio há, pelo menos, 60 anos. Assim, a afirmação contundente de não existência de He_2 pela justificativa da família à qual pertence encontra o obstáculo de que os elementos químicos mais pesados do mesmo grupo, podem realizar ligações e formar compostos. Consequentemente, há a impossibilidade de se pautar corretamente a exclusão de ligação com a família 18. Outro ponto

bastante elencado pelos estudantes é o de completo preenchimento da camada de valência acarretando uma camada completa. Essa observação parte da estabilidade da configuração da camada de valência com base no atendimento do preenchimento completo. Não está errado considerar isso como um motivo para o hélio não realizar a ligação química, porém é possível avançar por entre modelos mais completos. Esse avanço foi observado em dois grupos que utilizaram a Teoria do Orbital Molecular (TOM). Esses grupos são os mesmos que a utilizaram anteriormente com o hidrogênio e mantiveram sua linha de pensamento para a nova situação. Para o grupo 4 a ordem de ligação indica que não há formação dessa espécie, pois não há força atrativa capaz de estabilizá-la. Já o grupo 11 recorreu a um modelo mais simples para a partir do diagrama da TOM complementar a informação com o preenchimento igualitário de elétrons em orbitais ligantes e antiligantes.

Um momento bastante interessante da atividade foi o confronto de ideias quanto aos gases nobres. Como descrito na parte de interpretações, um estudante questionou a existência do hélio a partir do conhecimento de que alguns gases nobres poderiam fazer ligações químicas. Essa pergunta mobilizou a sala em repensar os próprios modelos. Ao utilizarem os modelos mais simples, chegariam ao ponto conflitante da pergunta. Claro que outros pontos, como as propriedades periódicas dos elementos mais pesados, ajudam a justificar a formação dos compostos envolvendo gases nobres. Porém, o uso da Teoria do Orbital Molecular (TOM) desata o estigma de que a ligação depende de pares de elétrons. Outrossim, tal modelo usufrui da interação de orbitais promovendo explicações mais amplas através da mecânica-quântica, consideração os orbitais moleculares antiligantes e não ligantes. A estabilidade do elemento tão vinculada ao pertencimento a família 18 de camada completa é mencionada por apenas um grupo junto a TOM, que usa o preenchimento dos orbitais ligantes e antiligantes para explicar que não há força atrativa resultante capaz de manter os dois átomos de hélio em ligação. A esquematização das categorias que surgiram pelos modelos expressos dos estudantes encontra-se na **Figura 85** que, em um primeiro momento, a configuração de um gás nobre teve destaque. Na sequência, a **Figura 86** exhibe a frequência de citações das categorias para o di-hélio.

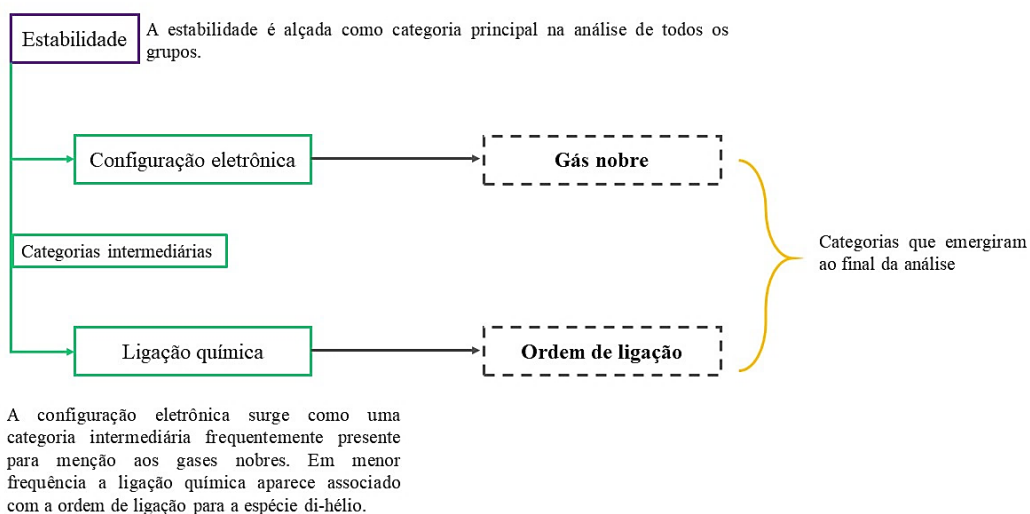


Figura 85 - Esquematização das categorias para o di-hélio – primeiro modelo.

Fonte: Obra dos autores.

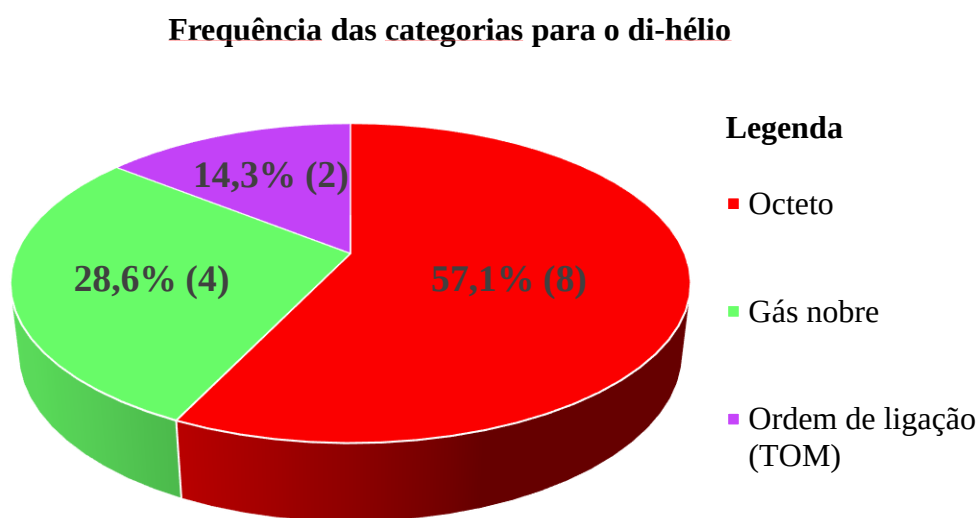


Figura 86 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hélio – primeiro modelo.

Fonte: Obra dos autores.

Categorias para o di-hidrogênio: segunda parte

Após a socialização, os grupos voltaram-se em sua maioria para o uso de teorias de ligação química avançadas, ou seja, aquelas que recorrem ao uso da mecânica quântica, conseqüentemente, houve maior citação da Teoria da Ligação de Valência (TLV) e da Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Em relação a Teoria da Ligação de Valência (TLV) houve o proveito das interações entre os orbitais atômicos. Os alunos destacaram a interação dos orbitais resultando na formação dos orbitais ligantes. Dessa formação de orbital ligantes resultaria na ligação química entre os átomos de hidrogênio.

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) aparece na forma de esboços do diagrama de orbitais moleculares. Algumas equipes destacaram ainda a ordem de ligação igual a 1 como uma maneira de comprovar a existência do di-hidrogênio por meio desse modelo. Ao conversar com os grupos que utilizaram essa teoria, foi possível notar que eles enxergaram que é válido considerar o orbital antiligante gerado pelos orbitais atômicos, algo que não é destacado pela Teoria da Ligação de Valência (TLV), mas que faz muito sentido na atividade. Isso se mostra forte no exemplo do hélio em que os grupos que empregaram a TOM se voltaram ao preenchimento dos orbitais moleculares antiligantes. Essa transição de um modelo com foco na interação construtiva para outro com destaque para ambas as interações permite um maior espectro de aplicações.

Comparativamente ao primeiro modelo proposto para o di-hidrogênio, a frequência de uso da palavra “estabilidade” foi menor. A pouca associação dessa palavra com as demais (sobreposição de orbitais, orbitais moleculares, compartilhamento) - pode indicar:

- Falta da percepção da ligação química como resultado da maior estabilidade do sistema;
- Dificuldade de reconhecer a distribuição dos elétrons por orbitais moleculares como um compartilhamento eletrônico e um pertencimento dos elétrons à molécula.

Há uma certa resistência na percepção de que os elétrons pertencem à molécula como um todo e nisso a tratativa de estabilidade da ligação química a partir dos orbitais atômicos é prejudicada. Antes o compartilhamento de pares eletrônicos compunha parte da justificativa para a estabilidade, o que não se observou na distribuição dos elétrons pelos orbitais, tanto para a TLV como para a TOM.

Alguns grupos realizaram o cálculo da ordem de ligação, concluindo a existência do di-hidrogênio. Por sua vez, a ordem da ligação também reflete a estabilidade do sistema já que o

preenchimento dos orbitais moleculares antiligantes enfraquece a ligação. A estabilidade depende desse preenchimento, afinal os orbitais moleculares ligantes posicionam-se em um nível de energia inferior aos dos orbitais atômicos isolados enquanto os antiligantes atingem um maior patamar energético. A relação estabilidade – preenchimentos dos orbitais moleculares foi mais bem discutida em apenas um grupo, sugerindo que o modelo de Lewis permanece fortemente vinculado a estabilidade na mente da maioria dos estudantes, em detrimento dos modelos mecânico-quânticos.

Abaixo, encontram-se as **Figura 87** e **Figura 88**, em que estão a esquematização das categorias e a frequência de citação. Percebe-se que em comparação com o modelo anterior para o di-hidrogênio há maior distribuição de expressões por entre as teorias de ligação química, sugerindo um avanço no domínio e aplicação dessas teorias.

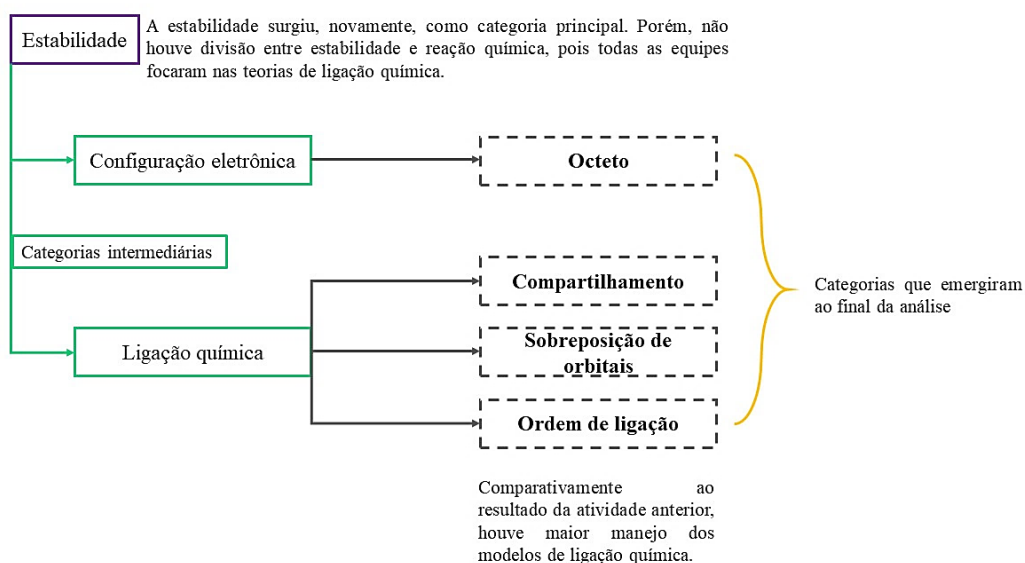


Figura 87 - Esquematização das categorias para o di-hidrogênio – segundo modelo.

Fonte: Obra dos autores.

Frequência das categorias para o di-hidrogênio

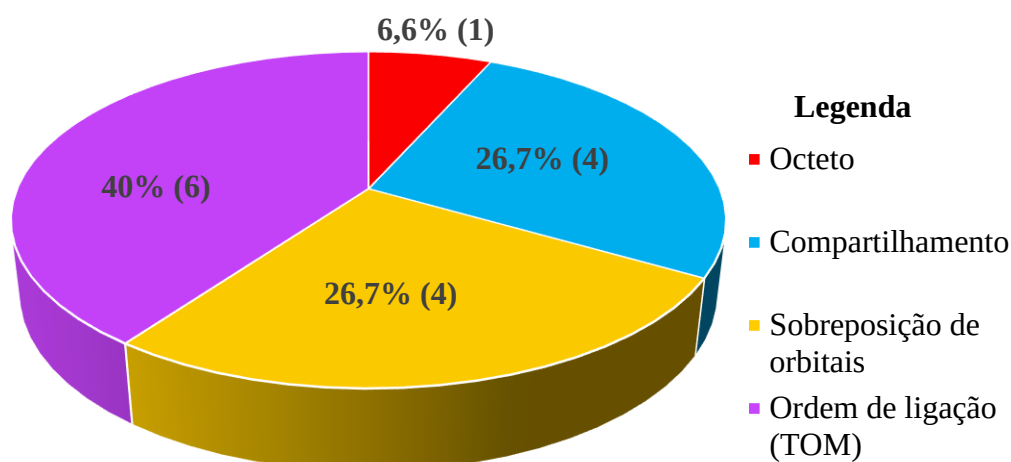


Figura 88 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hidrogênio – segundo modelo.

Fonte: Obra dos autores.

Remodelando: categorias para o di-hélio

Anteriormente a tratativa do hélio como um gás nobre e a necessidade da configuração eletrônica completa ganharam destaque nas considerações dos grupos. Entretanto, logo após a pergunta de um colega sobre as ligações químicas feitas por outros gases nobres, as respostas continuaram baseando-se nas mesmas categorias de anteriormente (**Figura 89**), entretanto com frequências distintas (**Figura 90**). Incentivados a saírem da zona de conforto mantida pela regra do octeto após a “provocação” do colega, os grupos voltaram-se, majoritariamente, para a Teoria do Orbital Molecular (TOM) por meio da ordem de ligação. Houve com frequência o uso da palavra “cancela”, pois de forma geral foi compreendido que o efeito estabilizador do Orbital Molecular Ligante (OML) seria cancelado pelo Orbital Molecular Antiligante (OMAL). Com o hélio houve uma maior percepção de que a regra do octeto e a Teoria de Ligação de Valência (TLV) não são modelos tão preparados quanto a Teoria do Orbital Molecular (TOM) para tratar os gases nobres e outras exceções. Com isso, os alunos conseguiram transitar para um modelo mais complexo a partir das discussões levantadas.

Todavia, a nomeação dada ao elemento como um gás nobre, transparece um *status* de exceção da tabela periódica, a qual, não foi superada por duas equipes. Isso preconiza o pensamento enraizado de regras, criando obstáculos na superação e manejo do próprio modelo.

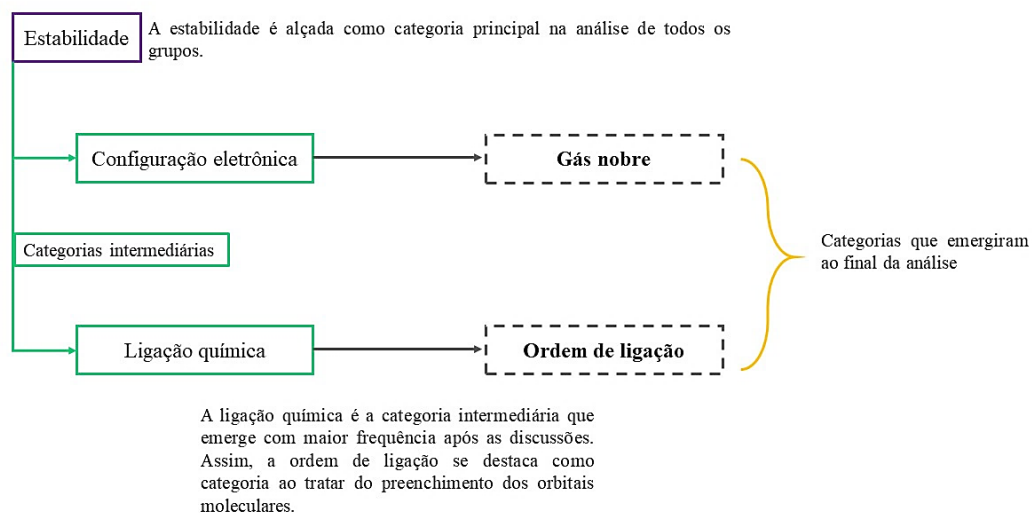


Figura 89 - Esquematização das categorias para o di-hélio – segundo modelo.

Fonte: Obra dos autores.

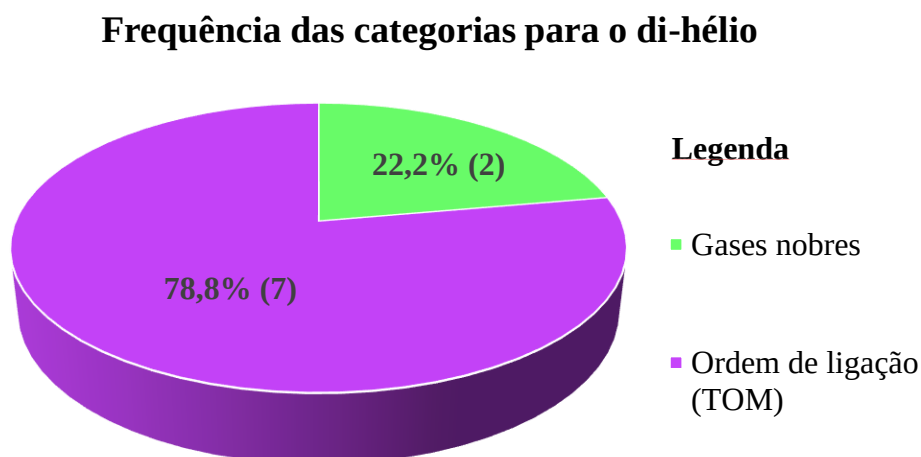


Figura 90 - Frequência da menção das categorias observadas para o di-hélio – segundo modelo.

Fonte: Obra dos autores.

Categorias para o diamagnetismo e paramagnetismo

A primeira grande pergunta dos discentes em seus grupos consistiu na composição da bolha de ar. Enquanto alguns corretamente trataram o gás di-nitrogênio como majoritário, outros trouxeram o gás carbônico, o gás di-oxigênio e o ácido carbônico. A indecisão sobre os constituintes vinha de duas ramificações: os que tomaram como base o ar atmosférico e os que focaram na expiração pelos pulmões. Àqueles que partiram dos gases atmosféricos utilizaram o N_2 ou o O_2 em seus modelos, porém os outros compostos foram citados como sendo produtos da expiração pulmonar humana. Assim, o gás carbônico surgiu como uma opção viável para eles por meio das trocas gasosas nos alvéolos pulmonares.

Quanto aos fenômenos, as equipes dividiram-se em três eixos principais: **i)** aqueles que enxergaram alguma barreira nas interações entre ímã e bolha; **ii)** os que partiram do estabelecimento de ligações químicas entre variados atores e **iii)** os que trouxeram as interações eletromagnéticas.

Dois grupos trouxeram a ideia de uma barreira como ponto bloqueador da interação ímã – bolha. Conversando com um desses grupos para entender o modelo, tem-se que uma forte interação eletrostática entre os componentes do detergente e a água impediria a interação do ímã com o gás pela película feita do tensoativo. Outro grupo também tratou o detergente como uma película e para ambos não ocorreria interação ímã-bolha.

Outros três grupos priorizam as ligações químicas como justificativa central. As equipes consideraram que não ocorreria ligação entre ímã e a bolha, porém fora apresentado como se isso fosse possível de acontecer caso houvesse condições para tal. Não obstante, esses grupos citam fortes ligações entre os átomos dos gases como motivo para não ocorrer a ligação com o ímã. De fato, a ligação tripla do di-nitrogênio, por exemplo, é forte. Assim, não há equívoco nessa informação, porém ao se tratar de um ímã deve se considerar o campo magnético exercido por ele junto aos domínios magnéticos do material exposto. A ideia da ligação química pode ter surgido tanto pelo tema trabalhado como pela maneira que a modelagem foi apresentada. Entretanto, quando se trata de um tema da química há uma diversa gama de assuntos que se conectam e criam uma rede de informações a serem interpretadas. Os modelos de Lewis e da Teoria da Ligação de Valência (TLV) não tratam de fenômenos para- e diamagnéticos ao contrário da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Tais fenômenos magnéticos são interpretados por meio do orbital Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia (HOMO) nos diagramas de orbitais moleculares.

Outro ponto observado é que nenhuma equipe citou a denominação Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia (HOMO) ao tratar da ocupação desse orbital molecular para os gases O_2 e N_2 . Considerando que essa foi a primeira aproximação dos alunos com esses termos e com o esboço dos diagramas, é natural que acabem por indicar os orbitais de interesse através de outros nomes como, por exemplo, “*orbital 2p*”. É interessante destacar que apenas um dos grupos colocou com maior clareza a interação dos elétrons desemparelhados do di-oxigênio com o ímã por meio da ação do campo magnético. Falar do magnetismo implica em um campo de atração o que por si só não condiz com a ideia de outros grupos do estabelecimento da ligação química. Isso sugere que para parte da sala a atuação do campo magnético não está devidamente compreendida. As categorias surgidas nessa atividade surgem da interação ímã e bolha conforme a **Figura 91**.

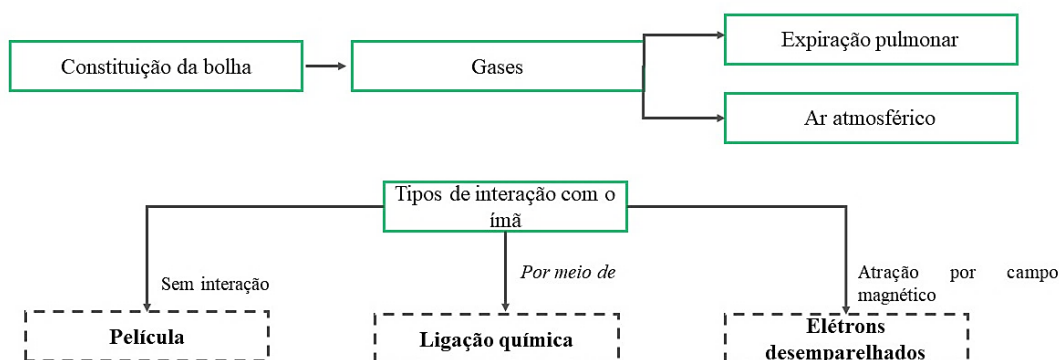


Figura 91 – Esquematização das categorias surgidas para o dia- e paramagnetismo das moléculas N_2 e O_2 .

Fonte: Obra dos autores.

Se na primeira parte da atividade houve uma divisão em 3 eixos principais em relação ao ímã e a bolha de ar, após a exibição do vídeo didático e da socialização dos colegas apenas um eixo ganhou notoriedade. Reportar os elétrons desemparelhados e emparelhados, respectivamente, no orbital Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia (HOMO) para as espécies O_2 e N_2 esteve presente em toda menção na segunda parte. Cabe destacar que, em geral, os alunos focaram nos gases principais da atividade e continuaram não adotando os termos Orbital Molecular Ocupado de Maior Energia (HOMO) e Orbital Molecular Desocupado de Menor Energia (LUMO). Com isso, surgiram o “semi-emparelhamento de orbitais” e os “elétrons não ligantes”. Porém, também se viu o manejo com os diagramas específicos e a percepção de que não há ligação química feita com o ímã e o gás, avanços importantes em um assunto que voltará ao longo do terceiro semestre.

Discussão acerca da Unidade Didática Multiestratégica (UDM)

Morales (2021) propôs um instrumento de avaliação para a Unidade Didática Multiestratégica (UDM) que abrange dois grandes centros, conforme o **Quadro 10**.

Em um primeiro grande bloco há a concentração sobre as interações entre os vários elementos do planejamento, sendo chamado de “Interrelação entre os vários elementos do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM”. No segundo grande bloco, a análise se concentra sobre um aspecto primordial da UDM, a abordagem metodológica, junto a elementos do planejamento, sendo denominada de “Abordagem metodológica como eixo axial do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM”.

Interrelação entre os vários elementos do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM					
ID	Critérios de avaliação	Descrição	Adequado		
			SIM	PARCIALMENTE	NÃO
A1)	A UDM pode ser desenvolvida no contexto real da intervenção?	Adequação das atividades, estratégias didáticas, recursos didáticos e materiais de aprendizagem propostos com a infraestrutura da escola e número de alunos na turma.			
A2)	Os conteúdos definidos estão articulados com as orientações curriculares oficiais?	Adequação do conteúdo com a seriação e amplitude definidas nas orientações curriculares oficiais.			
A3)	Os objetivos respeitam a estrutura da taxonomia de Bloom revisada e apresentam coerência com os conteúdos propostos?	Os objetivos devem apresentar verbos, substantivos e gerúndios. Esses devem permitir a explicitação dos conteúdos, as formas de alcançá-los e os instrumentos para avaliação. Além disso, verbo no infinitivo e no gerúndio devem estar no relacionados segundo a taxonomia de Bloom revisada. Pretende-se, também, verificar a adequação dos objetivos com os conteúdos.			
A4)	Os níveis da dimensão dos processos cognitivos e conhecimento estão adequados nos objetivos geral e específicos?	O objetivo geral deve estar em nível da dimensão processo cognitivo e conhecimento igual ou superior aos níveis dos objetivos específicos. É desejável que o nível da dimensão conhecimento tenha estrutura hierárquica.			

A5)	São propostas múltiplas estratégias didáticas?	Uma das premissas centrais da UDM. Para UDM é fundamental que o professor utilize uma pluralidade de estratégias didáticas para abranger as especificidades de cada conteúdo e a diversidade de modos de aprender dos alunos em uma sala de aula.			
A6)	As estratégias didáticas apresentam correspondências com os objetivos de aprendizagem?	As estratégias didáticas devem estar articuladas com os objetivos de ensino propostos.			
A7)	Os instrumentos/estratégia de avaliação/ materiais de aprendizagem apresentam relação com os objetivos propostos na UDM?	Os instrumentos/estratégia de avaliação/ materiais de aprendizagem devem permitir avaliar se os objetivos propostos foram atingidos.			
A8)	Os recursos didáticos e a organização da sala estão adequados para trabalhar dentro das premissas das estratégias didáticas?	Os recursos didáticos e a organização da sala devem possibilitar que se trabalhe adequadamente com as estratégias didáticas selecionadas.			
A9)	As SD preveem tempo para atividades que não estão relacionadas com o conteúdo, com o propósito de adequar tempo e conteúdo?	São exemplos dessas atividades: deslocamento dos alunos de uma sala para outra, momento da atribuição de presença, tempo gasto na montagem de experimentos, entre outros.			
Abordagem metodológica como eixo axial do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM					
B1)	Os conteúdos são adequados aos princípios estabelecidos pela abordagem metodológica?	Os conteúdos a serem trabalhados ao longo da UDM precisam guardar coerência com os princípios pedagógicos propostos pela abordagem metodológica escolhida.			
B2)	A abordagem metodológica permite trabalhar com algumas concepções alternativas e/ou obstáculos epistemológicos sobre a temática?	A abordagem metodológica deve ser adequada para trabalhar algumas concepções alternativas e/ou os principais obstáculos epistemológicos encontrados na literatura.			
B3)	Os objetivos geral e específicos estão definidos de forma coerente com a abordagem metodológica?	Os objetivos de aprendizagem definidos na UDM devem estar alinhados aos propósitos educativos definidos na abordagem metodológica.			
B4)	As atividades propostas na UDM estão articuladas com os princípios fundamentais da abordagem metodológica?	A UDM deve ter potencialidade de proporcionar a vivência das premissas da abordagem metodológica.			

B5)	As estratégias didáticas propostas estão relacionadas com os princípios da abordagem metodológica?	As estratégias didáticas devem ser condizentes com as etapas/momentos fundamentais da abordagem metodológica.			
B6)	As estratégias/instrumentos de avaliação estão de acordo com os princípios da abordagem metodológica?	As estratégias/instrumentos de avaliação devem possibilitar o acompanhamento das atividades desenvolvidas pelos alunos na perspectiva da abordagem metodológica.			

Quadro 10 - Instrumento de análise de interrelação entre elementos da UDM.

Fonte: Adaptado de Morales (2021, p. 236).

A partir das orientações dadas por Morales (2021) para analisar a UDM em uma primeira e última versão, pode-se apontar dificuldades que foram superadas ou que ainda persistem na organização da unidade, aspectos a se reajustar e o alinhamento dos elementos da UDM. Por conta disso, a seguir encontra-se esse comparativo entre a primeira e a segunda versão da UDM através do **Quadro 10** e **Quadro 11**.

Interrelação entre os vários elementos do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM				
ID	Critérios de avaliação	Adequado		
		SIM	PARCIALMENTE	NÃO
A1	A UDM pode ser desenvolvida no contexto real da intervenção?	X		
A2	Os conteúdos definidos estão articulados com as orientações curriculares oficiais?	X		
A3	Os objetivos respeitam a estrutura da taxonomia de Bloom revisada e apresentam coerência com os conteúdos propostos?		X	
A4	Os níveis da dimensão dos processos cognitivos e conhecimento estão adequados nos objetivos geral e específicos?			X
A5	São propostas múltiplas estratégias didáticas?			X

A6	As estratégias didáticas apresentam correspondências com os objetivos de aprendizagem?		X	
A7	Os instrumentos/estratégia de avaliação/ materiais de aprendizagem apresentam relação com os objetivos propostos na UDM?		X	
A8	Os recursos didáticos e a organização da sala estão adequados para trabalhar dentro das premissas das estratégias didáticas?	X		
A9	As SD preveem tempo para atividades que não estão relacionadas com o conteúdo, com o propósito de adequar tempo e conteúdo?		X	
Abordagem metodológica como eixo axial do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM				
B1	Os conteúdos são adequados para serem trabalhados na abordagem metodológica?	X		
B2	A abordagem metodológica permite trabalhar com algumas concepções alternativas e/ou obstáculos epistemológicos sobre a temática?	X		
B3	Os objetivos geral e específicos estão relacionados com a abordagem metodológica?		X	
B4	As atividades propostas na UDM estão articuladas com os princípios fundamentais da abordagem metodológica?	X		
B5	As estratégias didáticas propostas estão relacionadas com os princípios da abordagem metodológica?	X		
B6	As estratégias/instrumentos de avaliação estão de acordo com os princípios da abordagem metodológica?			X

Quadro 11 - Primeira interrelação entre elementos da UDM para a primeira versão.

Fonte: Adaptado de Moralles (2021, p. 236).

Interrelação entre os vários elementos do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM				
ID	Critérios de avaliação	Adequado		
		SIM	PARCIALMENTE	NÃO
A1	A UDM pode ser desenvolvida no contexto real da intervenção?	X		
A2	Os conteúdos definidos estão articulados com as orientações curriculares oficiais?	X		
A3	Os objetivos respeitam a estrutura da taxonomia de Bloom revisada e apresentam coerência com os conteúdos propostos?	X		
A4	Os níveis da dimensão dos processos cognitivos e conhecimento estão adequados nos objetivos geral e específicos?	X		
A5	São propostas múltiplas estratégias didáticas?	X		
A6	As estratégias didáticas apresentam correspondências com os objetivos de aprendizagem?	X		
A7	Os instrumentos/estratégia de avaliação/ materiais de aprendizagem apresentam relação com os objetivos propostos na UDM?	X		
A8	Os recursos didáticos e a organização da sala estão adequados para trabalhar dentro das premissas das estratégias didáticas?		X	
A9	As SD preveem tempo para atividades que não estão relacionadas com o conteúdo, com o propósito de adequar tempo e conteúdo?		X	
Abordagem metodológica como eixo axial do planejamento didático-pedagógico no modelo da UDM				
B1	Os conteúdos são adequados para serem trabalhados na abordagem metodológica?	X		
B2	A abordagem metodológica permite trabalhar com algumas concepções alternativas e/ou obstáculos epistemológicos sobre a temática?	X		
B3	Os objetivos gerais e específicos estão relacionados com a abordagem metodológica?		X	

B4	As atividades propostas na UDM estão articuladas com os princípios fundamentais da abordagem metodológica?	X		
B5	As estratégias didáticas propostas estão relacionadas com os princípios da abordagem metodológica?	X		
B6	As estratégias/instrumentos de avaliação estão de acordo com os princípios da abordagem metodológica?	X		

Quadro 12 - Última interrelação entre elementos para a última versão da UDM.

Fonte: Adaptado de Morales (2021, p. 236).

O comparativo entre os dados reflete de certo modo o processo de desenvolvimento da UDM.

O primeiro grande bloco reúne todos os elementos do planejamento. É interessante observar que esse bloco preza pela coerência entre os elementos. Em uma primeira versão, a completude das etapas não atingiu toda sua potencialidade. Apesar do conteúdo se relacionar com coerência à abordagem metodológica, traçar os objetivos foi um obstáculo revisto por diversas vezes. Ao trazer consigo aquilo que se pretende alcançar, os objetivos demandam a organização dos recursos disponíveis para que seja possível cumpri-los, dialoga com a metodologia de ensino e guia junto a ele os instrumentos de avaliação. Além disso, os objetivos de aprendizagem, formulados de maneira a organizar o conteúdo e a avaliação, necessitam de um respeito à hierarquia cognitiva conforme trazido Ferraz e Belhot (2010), algo a ser trabalhado no início da formulação da UDM. Por conseguinte, não foi possível atender de forma satisfatória a criação de objetivos vinculados ao avanço das dimensões cognitivas. O processo de construção levou a reflexão das estratégias didáticas reiteradamente. Consequentemente, os instrumentos de avaliação não foram muito bem desenvolvidos nessa primeira etapa.

O segundo bloco do instrumento de avaliação da UDM, que destaca a relação dos elementos com a abordagem metodológica, reforça a importância desse eixo orientador, afinal os conteúdos possuem amparo na metodologia utilizada. Essa coerência presume que o restante da UDM possa passar pelas reflexões e reformulações necessárias para se adequar aos objetivos. Dessa forma, após algum tempo, se pôde visualizar a UDM, conforme presente no Apêndice, de maneira a respeitar a abordagem metodológica adotada para o desenvolvimento da TOM. Com isso, o objetivo central da UDM responde ao modelo científico trazido pela TOM ao estudo das ligações químicas. Para a tratativa desse tema foram usadas estratégias didáticas de

maneira a discutir, segundo a demanda curricular para um primeiro ano, os contrastes entre os modelos da TOM e TLV. Com isso, os instrumentos de avaliações foram aproximados das atividades executadas. Na última versão os instrumentos de avaliação foram planejados de maneira formativa, contemplando atividades em equipe e por execução individual, considerando a participação na modelagem. O número total de aulas foi maior que o previsto, pois a turma é numerosa e o assunto é relevante, porém extenso a ser trabalhado de maneira participativa. As atividades em equipe tomaram maior tempo que o esperado, entretanto foram importantes para o desenvolvimento de toda a sequência. Outro ponto sensível quanto às interrelações dos elementos da UDM integra o espaço físico. As aulas aconteceram em uma sala moderadamente espaçosa, mas com uma disposição de degraus e carteiras que atrapalharam um melhor e mais confortável posicionamento dos alunos para as discussões entre si. Um comparativo resultante da reflexão acerca do processo construtivo da UDM, proporcionado pelas interrelações entre os elementos, é exibido na **Figura 92**.

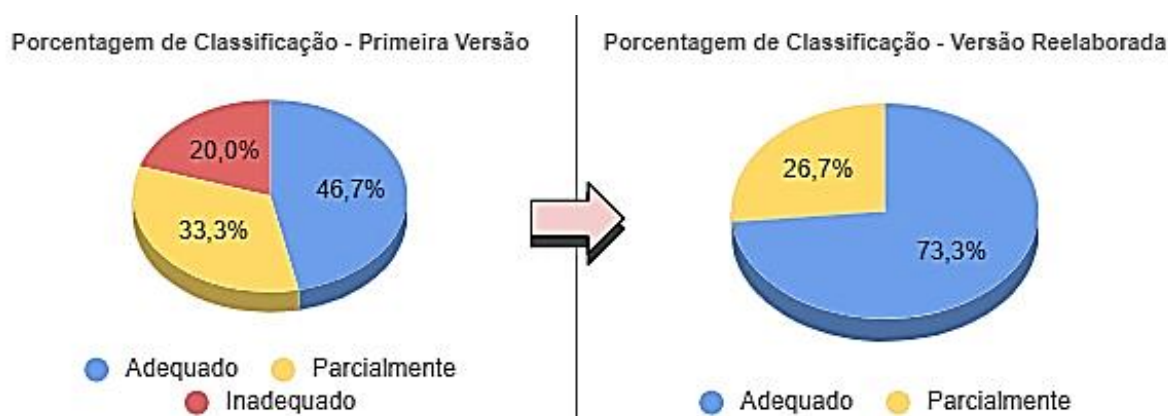


Figura 92 - Representação gráfica comparativa entre versões da UDM.

Fonte: Obra dos autores.

6.2 Parte II

As energias de ligação das moléculas diatômicas homonucleares dos átomos dos elementos representativos podem ser aproximadamente determinadas por propriedades dos átomos isolados.

A energia de dissociação das moléculas diatômicas homonucleares (BDE) pode ser representada como uma propriedade periódica dos átomos dos elementos químicos. Quando representada graficamente em função do número atômico percebe-se uma variação complexa, porém com regularidades, as quais podem ser associadas as características das famílias da tabela periódica. Essa variação pode ser observada na **Figura 93**, na qual é ressaltado o período no qual são encontrados os átomos dos elementos formadores da molécula diatômica homonuclear. Excetuando-se os metais de transição, percebe-se uma tendência a partir do segundo período da tabela periódica de aumento da BDE em função de Z até um máximo que ocorre na família do nitrogênio seguido da redução da BDE até a família dos gases nobres.

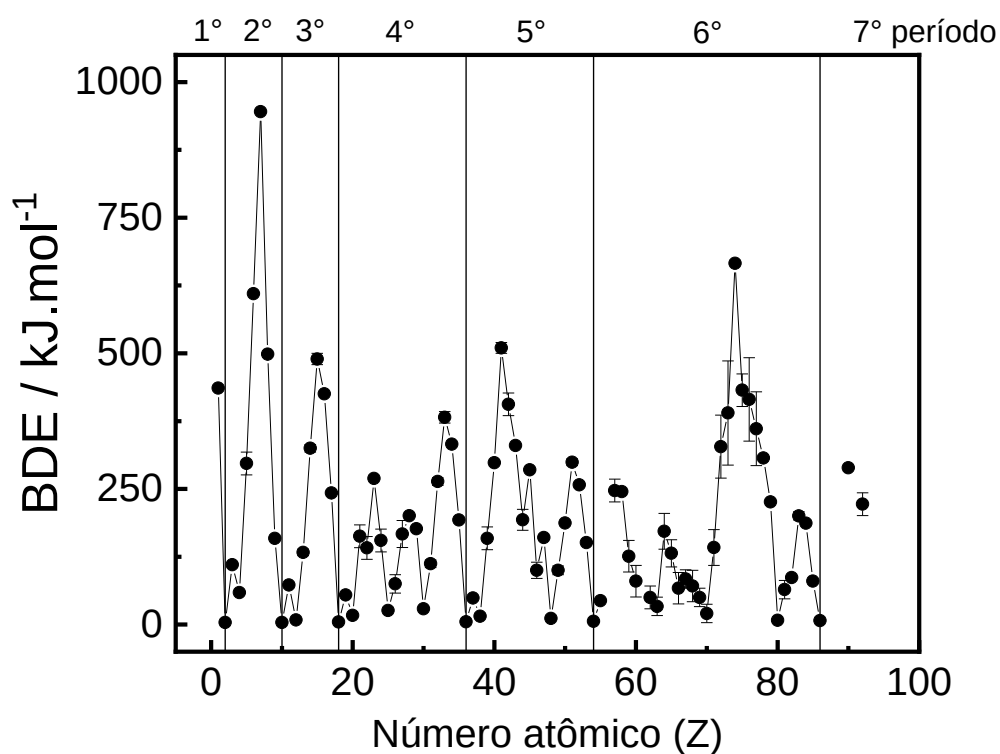


Figura 93 - Energia de dissociação de ligação (BDE) para as moléculas diatômicas homonucleares.

Fonte: Obra dos autores.

A variação de BDE com Z sugere que essa propriedade é diretamente proporcional ao número de elétrons desemparelhados (η) da configuração eletrônica de valência de maior energia do átomo que forma a molécula diatômica homonuclear. De fato, é interessante observar que essa propriedade do átomo isolado é numericamente igual a ordem de ligação da molécula diatômica homonuclear quando considerada a Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM). Para os metais alcalino terrosos, bem como os gases nobres, famílias nos quais os átomos apresentam configurações de valência completas (ns^2 no caso dos metais alcalino terrosos e ns^2np^6 para os gases nobres, na qual n é o número quântico principal das configurações de valência) a ordem de ligação é nula de modo que a BDE observada para moléculas diatômicas homonucleares formadas por estes átomos tem valores baixos (a BDE média observada na tabela periódica é de 196,964 kJ.mol⁻¹, enquanto as BDE médias observadas para os metais alcalino terrosos e para gases nobres são respectivamente 22,8544 e 5,208 kJ.mol⁻¹ respectivamente). Tomando como exemplo os átomos dos elementos do segundo período da tabela periódica, ou seja, lítio ($\eta = 1$), berílio ($\eta = 0$), boro ($\eta = 1$), carbono ($\eta = 2$), nitrogênio ($\eta = 3$), oxigênio ($\eta = 2$), flúor ($\eta = 1$) e neônio ($\eta = 0$); tem-se que a ordem de ligação (ϖ) nas moléculas dilítio Li₂ ($\varpi = 1$), diberílio Be₂ ($\varpi = 0$), diboro B₂ ($\varpi = 1$), dicarbono C₂ ($\varpi = 2$), dinitrogênio N₂ ($\varpi = 3$), dióxigênio O₂ ($\varpi = 2$), diflúor F₂ ($\varpi = 1$) e dineônio Ne₂ ($\varpi = 0$) é numericamente igual ao número de elétrons desemparelhados da configuração eletrônica de valência de maior energia do átomo isolado, ou seja, $\varpi = \eta$. Até mesmo para as moléculas diatômicas heteronucleares verifica-se uma relação semelhante, exceto para o monóxido de carbono. Neste caso a ordem de ligação é numericamente igual a média aritmética entre o número de elétrons desemparelhados dos átomos que constituem a molécula. Por exemplo, considerando a molécula de NO, verifica-se uma ordem de ligação de $\varpi(NO) = 2,5$. Este valor é exatamente $[\eta(N) + \eta(O)]/2$. Assim, pode-se concluir que se a energia de ligação é diretamente proporcional a ordem de ligação ϖ , deverá ser também proporcional ao número de elétrons desemparelhados dos átomos isolados η .

Como suposta propriedade periódica, sugere-se a análise da variação da BDE nas famílias da tabela periódica. Isto é feito pela representação gráfica de BDE em função de Z numa família em particular. Isto é, representa-se um gráfico de BDE(X) (BDE para o elemento X) em função de $Z(X)$ (número atômico do elemento X). A primeira família analisada é a dos metais alcalinos, pois forma moléculas diatômicas homonucleares no qual a ordem de ligação $\eta = 1$. Na **Figura 94** estão representadas as BDE para os metais alcalinos em função de Z . Os dados experimentais estão representados como círculos vermelhos. Os pontos quadrados pretos

(contribuição principal) são obtidos a partir da razão entre o número de elétrons desemparelhados no átomo isolado e o número de nós da parte radial da função de onda do elétron desemparelhado. Os pontos triangulares em azul (com contribuição adicional) são obtidos considerando-se uma contribuição adicional; a contribuição principal na qual considera-se um incremento em BDE proporcional a n^2 .

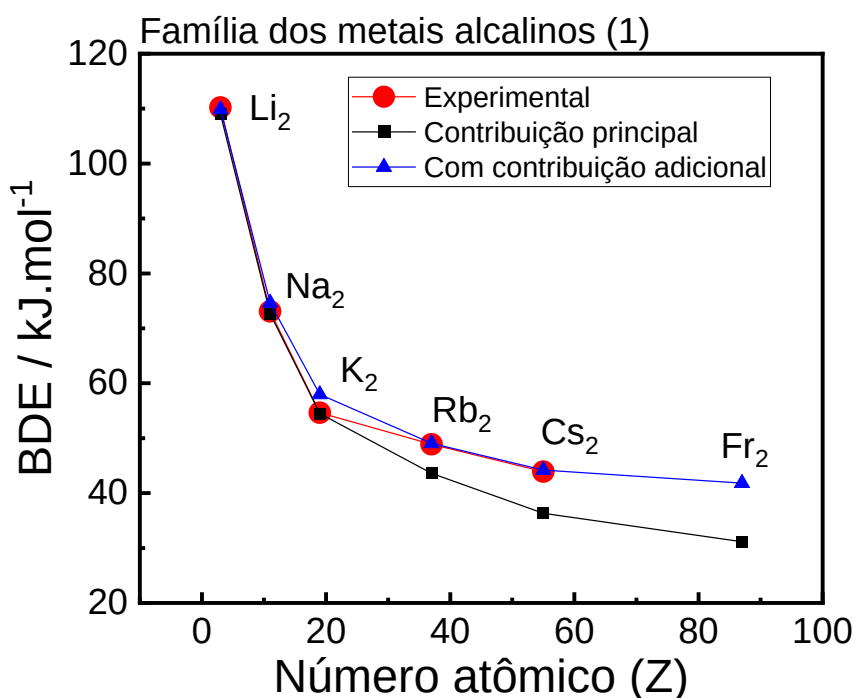


Figura 94 - BDE em função do número atômico para a família dos metais alcalinos.

Fonte: Obra dos autores.

Percebe-se que BDE diminui em função de Z . Nestas moléculas, tem-se os átomos interagindo entre si através do orbital s das configurações ns^1 dos metais alcalinos. Considera-se aqui a combinação linear dos orbitais atômicos que possuem elétrons desemparelhados, sugerindo-se para o estado fundamental da ligação química formada, a função de onda $k[\psi_{ns}(1) + \psi_{ns}(2)]$, sendo k a constante de normalização e $\psi_{ns}(i)$ a função de onda do átomo i . A combinação linear dos orbitais é claramente dependente do número de nós da parte radial da função de onda, já que a parte angular da função de onda se mantém a mesma para todas as moléculas da família. Assim, propõe-se que a diminuição da BDE na família dá-se pela combinação linear de orbitais atômicos que possuem cada vez mais nós radiais (combinação linear dificultada pelo número de nós radiais dos orbitais de valência), tornando a energia de dissociação da molécula cada vez menor.

Assim, é possível propor que a BDE é diretamente proporcional ao número de elétrons desemparelhados no átomo isolado e inversamente proporcional ao número de nós da parte radial da função de onda ($n - \ell - 1$). Para evitar que essa grandeza se anule, levando a uma indeterminação em BDE, propõe-se a relação da (Equação 46).

$$BDE \propto \frac{\eta}{[(n-\ell-1)+1]} \quad \text{Equação 46}$$

A proporcionalidade representada na (Equação 46) entre BDE e o número de elétrons desemparelhados no átomo e o número de nós da parte radial da função de onda do elétron desemparelhado deve ter como constante de proporcionalidade uma energia. Essa energia pode ser baseada na energia de dissociação da ligação da molécula de di-hidrogênio H_2 , que é a molécula mais simples dentre todas as moléculas diatômicas homonucleares representadas na (**Figura 93**). Além disso, a combinação linear dos orbitais atômicos 1s é estabelecida sendo que a parte radial da função de onda do orbital 1s não apresenta nós. Deste modo, tem-se uma referência de estrutura eletrônica e energia para as ligações estabelecidas nas moléculas diatômicas homonucleares. Para os metais alcalinos a constante de proporcionalidade entre BDE e a razão $\eta/[(n - \ell - 1) + 1]$ parece ser $BDE(H_2)/2$. Portanto, é possível estabelecer a relação da (Equação 47).

$$BDE = \frac{\eta}{[(n-\ell-1)+1]} \mathcal{E} \quad \text{(Equação 47)}$$

Na qual $\mathcal{E} = BDE(H_2)/2$ para os metais alcalinos. Os resultados obtidos pela (Equação 47) estão representados na **Figura 94** pelos prontos pretos quadrados, chamando essa aproximação de “contribuição principal” a BDE. Nota-se uma excelente correlação entre os dados experimentais e os dados das primeiras três moléculas diatômicas homonucleares, isto é, dilítio Li_2 , disódio Na_2 e dipotássio K_2 , sendo que para o dirubídio Rb_2 e dicésio Cs_2 BDE experimental é maior do que os dados obtidos por essa contribuição principal a BDE. A **Tabela 1** apresenta os valores de BDE experimentais e os valores de BDE calculados para as moléculas diatômicas homonucleares formadas pelos metais alcalinos.

Tabela 1 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais contribuição adicional) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares formadas pelos metais alcalinos.

Z^a	X₂	BDE Exp.^{b,c}	BDE^{b,d}	Δ^f	BDE^{b,e}	Δ^f
3	Li ₂	110,21	108,997	-1,10	109,869	-0,309
11	Na ₂	73,0813	72,665	-0,570	74,6270	2,115
19	K ₂	54,63	54,4987	-0,240	57,9867	6,144
37	Rb ₂	48,898	43,599	-10,83	49,0489	0,309
55	Cs ₂	43,919	36,332	-17,27	44,1803	0,595
87	Fr ₂	-	31,142	-	41,8239	-

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE. ^eContribuição principal e contribuição adicional a BDE. ^fDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

Para considerar a diferença entre os valores calculados e os valores experimentais de BDE propõe-se um termo adicional no cálculo das energias de dissociação da ligação que cresce à medida que se percorre a família em questão, sendo este termo igual a $n^2/1000$, no qual n é o número quântico principal do orbital de valência que possui elétrons desemparelhados no átomo. Essa contribuição adicional a BDE melhora o valor observado para as energias de dissociação da ligação para os elementos mais pesados da família, no qual a diferença percentual sem essa contribuição é de -10,83% e -17,27% para dirubídio Rb₂ e dicésio Cs₂ passando para 0,309% e 0,595%, respectivamente. É preciso se ressaltar que há uma piora no valor de BDE calculado para o dipotássio K₂, no entanto, ao se considerar a contribuição adicional o valor médio da diferença percentual na família dos alcalinos passa de -6,12% para +1,77%. Uma aproximação excelente, já que BDE é estimado com diferença em torno de 2% para o valor experimental.

Para as demais famílias dos elementos representativos faz necessária a generalização da (Equação 47) no que diz respeito a constante de proporcionalidade $\mathcal{E}$. Para os metais alcalinos esse parâmetro foi considerado $\mathcal{E} = BDE(H_2)/2$, sendo generalizado para $\mathcal{E} = KBDE(H_2)$. A constante K tem uma variação na tabela periódica que aparenta ser dependente do tipo de orbital que contém elétrons desemparelhados (aqui representado pelo número quântico secundário do orbital, ℓ), bem como o número total de elétrons da configuração de valência que contém elétrons desemparelhados N , ou seja, como segue a (Equação 48).

$$K = \frac{\ell(N+1)+1}{2(2\ell+1)} \quad (\text{Equação 48})$$

Tomando como exemplo a família do boro, as configurações de valência (CV) para a família são ns^2np^1 , de modo que a configuração np^1 contém um elétron e este é desemparelhado, ou seja, para esta configuração $\ell = 1$ e $N = 1$. Portanto, assim como para a família dos alcalinos, a família do boro tem $K = 1/2$. Não se aplica a (Equação 48) para os metais alcalino terrosos por não apresentarem elétrons desemparelhados ($\eta = 0$), sendo futuramente discutidos juntamente aos gases nobres. Os valores da constante K para as famílias dos elementos representativos estão representados na **Tabela 2**.

Tabela 2. Valores da constante K para as famílias dos elementos representativos da tabela periódica, exceto para as famílias dos metais alcalino terrosos e dos gases nobres.

Família	CV ^a	η^b	ℓ^c	N^d	K
1	ns^1	1	0	1	1/2
2	ns^2	0	0	2	1/2
13	ns^2np^1	1	1	1	1/2
14	ns^2np^2	2	1	2	2/3
15	ns^2np^3	3	1	3	5/6
16	ns^2np^4	2	1	4	1
17	ns^2np^5	1	1	5	7/6
18	ns^2np^6	0	1	6	4/3

^aConfigurações de valência. ^bNúmero de elétrons desemparelhados na configuração de valência de maior energia.

^cNúmero quântico secundário da configuração que possui elétrons desemparelhados (maior energia). ^dNúmero total de elétrons da configuração eletrônica de valência que possui elétrons desemparelhados.

Neste momento é possível se aplicar a aproximação para as famílias 13-17 da tabela periódica. No caso da família do boro é preciso reconhecer que a variação de BDE experimental apesar de apresentar diminuição do seu valor ao longo da família, não é tão monotônica quanto a observada para os metais alcalinos. No entanto, apenas com a contribuição principal a BDE, representada pela (Equação 47) no qual é utilizado o termo $\mathcal{E}$ calculado a partir da constante K na (Equação 48) é obtida uma aproximação razoável para BDE para a família do boro. Os valores experimentais de BDE, representados por pontos circulares em vermelho, e a

aproximação para contribuição principal a BDE, retratadas por pontos quadrados pretos, estão na (Figura 95).

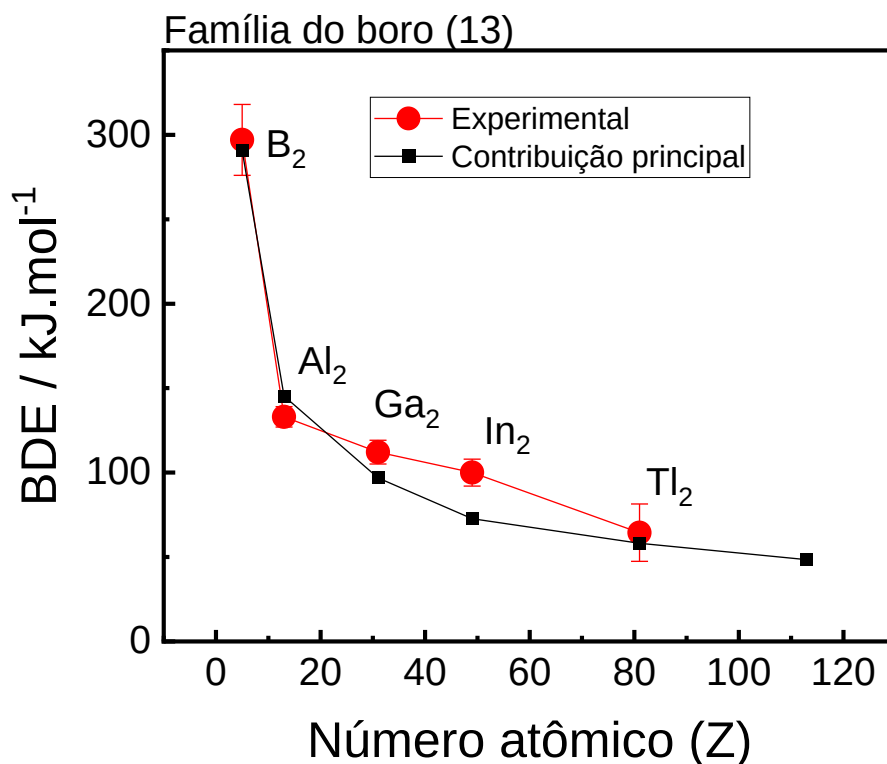


Figura 95 - Valores experimentais de BDE e valores calculados de BDE através da contribuição principal para a família do boro.

Fonte: Obra dos autores.

Tabela 3 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família do boro.

Z ^a	X ₂	BDE Exp ^{b,c}	BDE ^{b,d}	Δ ^e
5	B ₂	297	290,66	-2,134
13	Al ₂	133	145,33	9,271
31	Ga ₂	112,1	96,887	-13,57
49	In ₂	100	72,665	-27,34
81	Tl ₂	64,4	58,132	-9,733
113	Nh ₂	-	48,443	-

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

A diferença percentual média entre os valores calculados e experimentais de BDE observada para a família é de -8,70% o que é aceitável para uma primeira aproximação. São particularmente mais elevadas as diferenças percentuais obtidas para BDE em relação às moléculas de digálio Ga_2 e di-índio In_2 com valores de -13,57 % e -27,34 % respectivamente. No caso da família do boro desprezou-se a contribuição adicional já que as energias de dissociação da ligação são maiores em relação aos metais alcalinos. No entanto, considerando-se uma contribuição adicional a BDE nesta família, de forma $n^2/5$, a diferença percentual média cai a -4,57 %.

Para as famílias 14-17, a configuração de valência de maior energia (np^x , $x = 2 - 5$), a qual possuirá elétrons desemparelhados apresentará mais de um elétron. Há duas considerações a fazer:

- i. a presença de interações π e
- ii. a repulsão eletrônica entre os elétrons da configuração np^x . Em relação as interações π , a (Equação 47) ser modificada de modo que resulte na (Equação 49).

$$BDE = \frac{1}{[(n-\ell-1)+1]} \mathcal{E}_\sigma + \frac{(\eta-1)}{[(n-\ell-1)+1]} \mathcal{E}_\pi, \quad (\text{Equação 49})$$

na qual $\mathcal{E}_\sigma$ e $\mathcal{E}_\pi$ são os valores de referência para a energia de dissociação da ligação no caso de interações σ e π respectivamente. Entretanto, por simplicidade, apesar de claramente incoerente a suposição, considera-se, numa primeira aproximação, $\mathcal{E}_\sigma \approx \mathcal{E}_\pi = \mathcal{E}$, o que reduz a (Equação 49) na (Equação 47) o que é suficiente para mostrar a tendência de variação de BDE na tabela periódica. Além disso, nas moléculas diatômicas homonucleares será assumido interações σ e π fortes. Quanto a repulsão eletrônica na configuração np^x , considera-se um termo proporcional a $-1/(n-1)^3$, sendo a constante de proporcionalidade $\beta KBDE(H_2)$, resultando na (Equação 50).

$$BDE = \left\{ \frac{\eta}{[(n-\ell-1)+1]} - \frac{\beta}{(n-1)^3} \right\} \mathcal{E}, \quad (\text{Equação 50})$$

A constante K é a mesma definida pela (Equação 48), enquanto β pode ser ajustado para cada família a fim de se reproduzir os melhores valores de BDE. Uma vez que seja realizado esse procedimento, obtém-se os seguintes valores de β para as famílias de 14-17

respectivamente: 0,35; 0,85; 1,00; 0,73. Estes valores podem ser, aproximadamente, obtidos considerando,

$$\beta = \frac{N^2\eta}{32} \quad (\text{Equação 51})$$

com a qual são obtidos os valores 0,25; 0,84; 1,00 e 0,78.

Deste modo, utilizando-se as (Equações 50 e 51) podem ser calculadas as BDE para as famílias 14-17. Na família do carbono, a variação de BDE com o número atômico do elemento formador da molécula diatômica homonuclear está representada na **Figura 96**. Nesta figura estão representados os dados experimentais (pontos circulares vermelhos), bem como os dados calculados utilizando a contribuição principal à BDE (pontos quadrados pretos) e a soma da contribuição principal mais o termo de repulsão eletrônica (pontos triangulares azuis). Nota-se uma clara melhora dos dados calculados com a introdução do termo de repulsão eletrônica, principalmente para os dois primeiros elementos, ou seja, dicarbono C₂ e disilício Si₂. A comparação entre os dados experimentais com os dados calculados estão na **Tabela 4**. A média do desvio percentual para a família do carbono é excelente excluindo-se a molécula de dichumbo Pb₂, obtendo-se um valor de -0,130 % (mesmo considerando-se o dichumbo Pb₂ o desvio percentual médio é de 13,29 %). De fato, a aproximação é falha para a molécula de dichumbo Pb₂ obtendo-se uma diferença percentual de 66,98 % para BDE calculado em relação ao valor experimental.

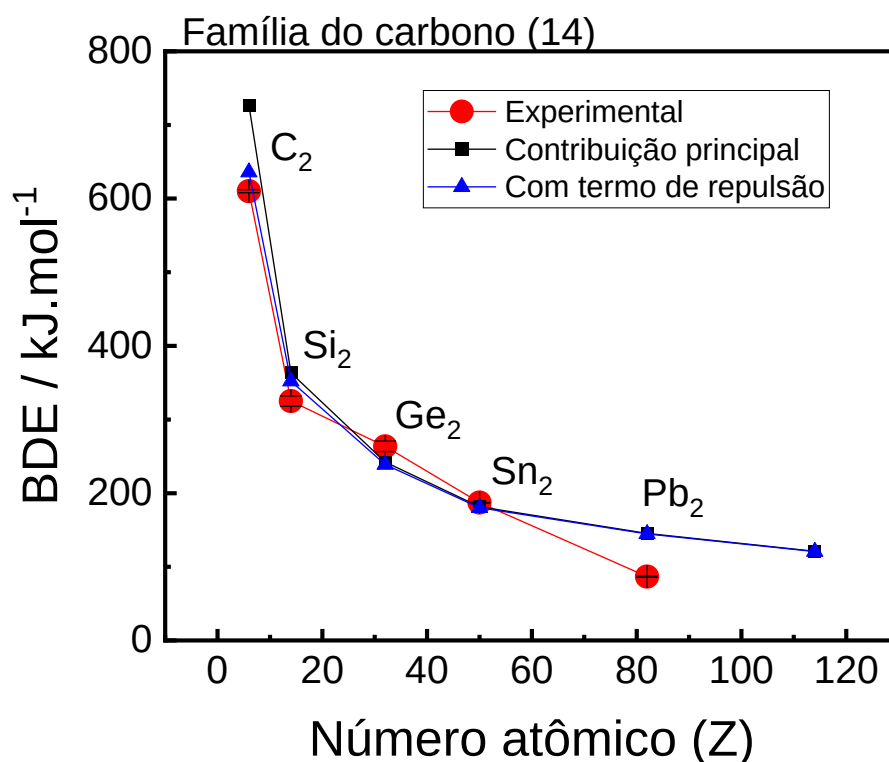


Figura 96 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família do carbono.

Fonte: Obra dos autores.

Tabela 4 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais repulsão eletrônica) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família do carbono.

Z ^a	X ₂	BDE Exp ^{b,c}	BDE ^{b,d}	Δ ^e
6	C ₂	610	635,81875	4,233
14	Si ₂	325	351,97109	8,299
32	Ge ₂	263,6	238,85255	-9,388
50	Sn ₂	187,1	180,24326	-3,665
82	Pb ₂	86,6	144,60335	66,98
114	Fl ₂	-	120,68782	-

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

Já para a família dos pinictogênios (15) observam-se os maiores valores de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares, sendo a molécula de N₂ possuidora da energia de

dissociação de ligação mais alta entre todas as moléculas analisadas. O que se nota é uma piora nos valores de BDE preditos pela aproximação proposta à medida que os valores de BDE tornam-se maiores. No entanto, a tendência de variação de BDE na família é descrita com precisão. O termo de repulsão eletrônica acrescido da contribuição principal a BDE prevê a energia de dissociação de ligação da molécula de dinitrogênio N_2 com uma diferença percentual de $-0,380\%$. Para os demais elementos do grupo mais uma vez os valores de BDE apresentam diferenças percentuais mais elevadas, falhando na descrição das moléculas de difósforo P_2 e dibismuto Bi_2 . A variação de BDE experimental (pontos vermelhos circulares) e calculado com a adoção de contribuição principal (pontos quadrados pretos) e com a contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica (pontos triangulares azuis) em relação ao número atômico do elemento formador da molécula diatômica homonuclear, estão representados na **Figura 97**.

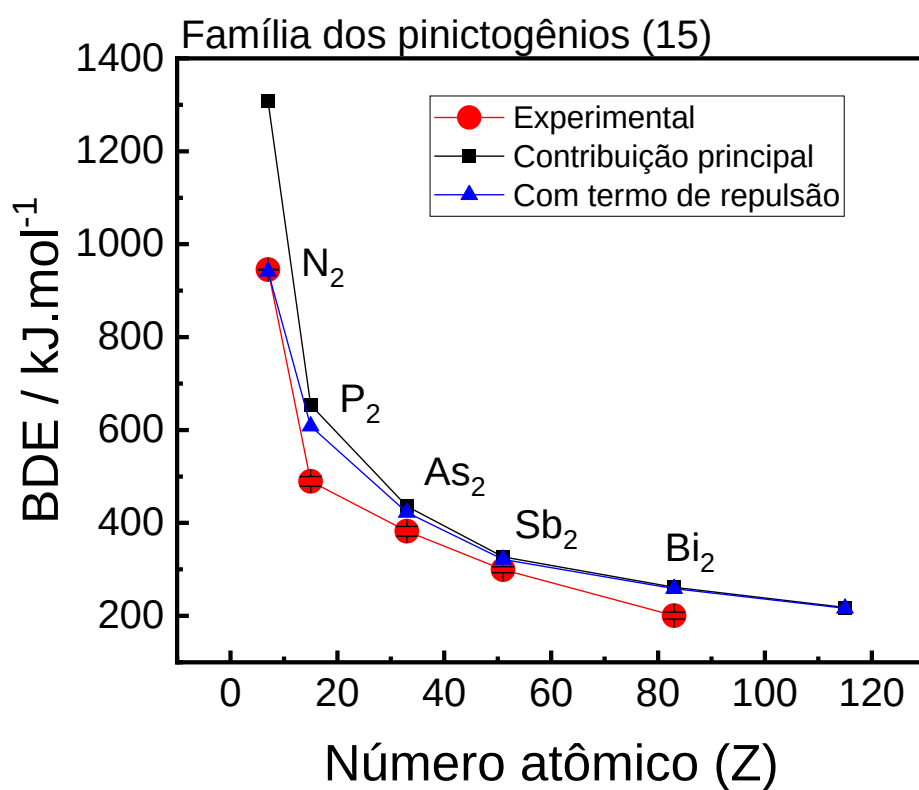


Figura 97 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família dos pnictogênios (15).

Fonte: Obra dos autores.

A comparação entre os dados experimentais e calculados para a família do pnictogênios está representada na **Tabela 5**. Mesmo com os desvios observados para difósforo P_2 e dibismuto

Bi₂ a diferença percentual média para a família é 14,18%, um valor razoável para uma primeira aproximação. Excluindo-se estas duas moléculas diatômicas obtém um valor de diferença percentual de 5,86%.

Tabela 5 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família dos pnictogênios (15).

Z^a	X₂	BDE Exp^{b,c}	BDE^{b,d}	Δ^e
7	N ₂	945,33	941,7384	-0,380
15	P ₂	489,5	608,20605	24,25
33	As ₂	382	422,42587	10,58
51	Sb ₂	299,2	321,27013	7,376
83	Bi ₂	200,4	258,66415	29,074
115	Mc ₂		216,29948	

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

A aproximação proposta volta a ser particularmente boa para a família dos calcogênios. Mesmo para os elementos mais pesados da família observa-se valores precisos de BDE calculados em relação aos valores experimentais. Há uma ótima correlação entre os dados experimentais (pontos circulares vermelhos) e os valores de BDE relativos à contribuição principal mais o termo de repulsão eletrônica (pontos triangulares azuis), como pode ser observado na **Figura 98**.

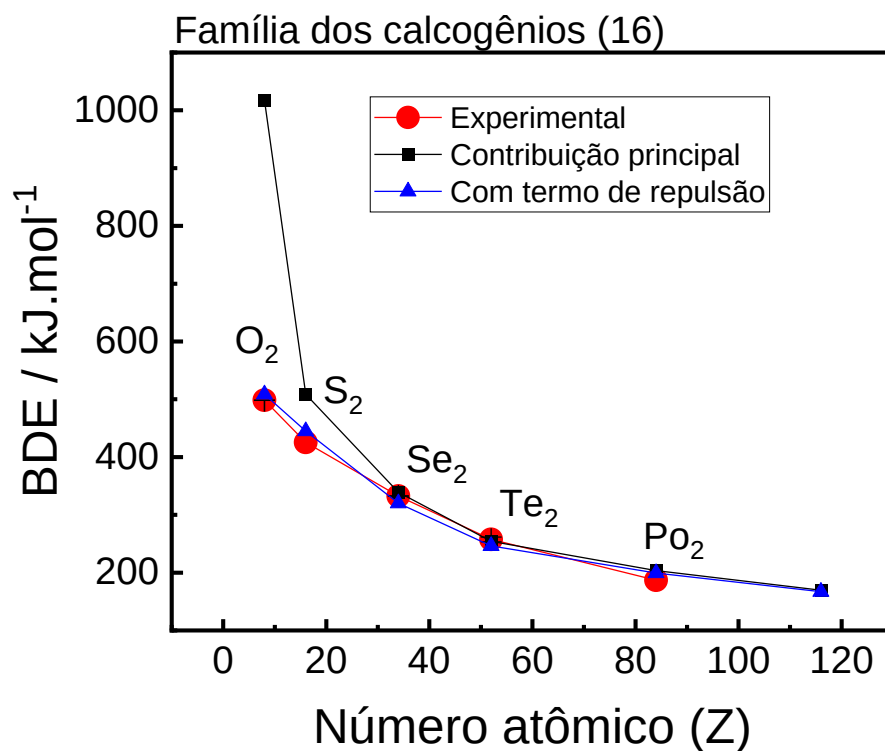


Figura 98 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família dos calcogênios (16).

Fonte: Obra dos autores.

Neste caso, o termo de repulsão eletrônica é essencial para a descrição do comportamento de BDE em função do número atômico. A tendência para a família é descrita com precisão. A diferença percentual média para a família é de apenas 1,06 %, sendo a maior diferença observada para a molécula de dipolônio Po₂, isto é, 6,63 %. Os dados obtidos para BDE para a família dos calcogênios estão contidos na **Tabela 6**.

Tabela 6 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família dos calcogênios (16).

Z^a	X₂	BDE Exp^{b,c}	BDE^{b,d}	Δ^e
8	O ₂	498,36	508,66	2,06578
16	S ₂	425,3	445,07	4,64922
34	Se ₂	332,6	320,26	-3,70888
52	Te ₂	257,6	246,38	-4,35568
84	Po ₂	187	199,39	6,62714
116	Lv ₂	-	167,20	-

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

Finalmente a família dos halogênios é descrita com precisão pela aproximação proposta exceto para as moléculas de diflúor F₂ e di-astato At₂, as quais são obtidas diferenças percentuais de BDE de valores -19,45 % e 40,80 %. Para os demais halogênios a diferença percentual média obtida é de -6,75 %. Levando em consideração todos os halogênios obtém para a diferença percentual pequena de 0,218 %, entretanto isto se deve as variações de BDE ao longo da família. Os dados de BDE experimental e calculado estão representados na **Tabela 7**. É preciso se ressaltar que é observada uma tendência correta para a variação de BDE na família, como pode ser visto na **Figura 99** em que pontos circulares vermelhos retratam os valores de BDE experimental, pontos quadrados pretos simbolizam a BDE encontrada junto a contribuição principal e pontos triangulares azuis exprimem a BDE a partir da contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica.

Tabela 7 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família dos halogênios (17).

Z^a	X_2	BDE Exp ^{b,c}	BDE ^{b,d}	Δ^e
9	F ₂	158,78	127,89	-19,45
17	Cl ₂	242,58	233,98	-3,544
35	Br ₂	192,807	176,98	-8,209
53	I ₂	151,088	138,25	-8,500
85	At ₂	80	112,64	40,80
117	Ts ₂	-	94,787	-

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

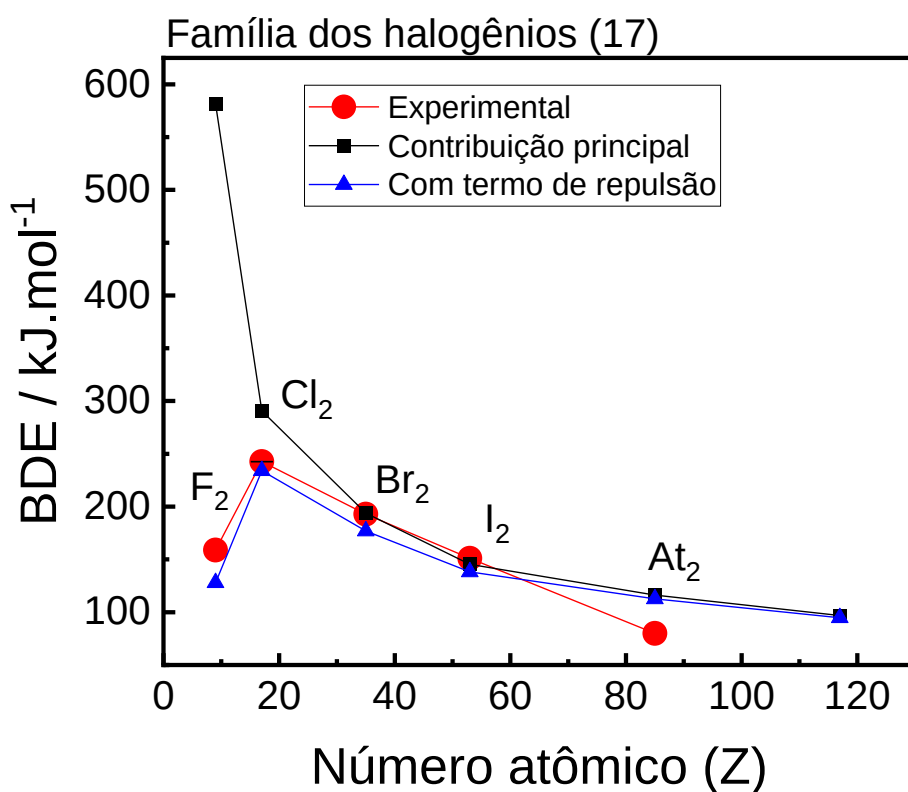


Figura 99 - BDE experimental e BDE calculada: BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de repulsão eletrônica para a família dos halogênios (17).

Fonte: Obra dos autores.

De volta as famílias dos alcalino terrosos e dos gases nobres, percebe-se pelas Equações 50 e 51 que a BDE prevista é nula pois em ambas as famílias se tem $\eta = 0$. No entanto, pode-se partir da (Equação 49) em que para átomos sem elétrons desemparelhados obtém-se a (Equação 52).

$$BDE = \frac{1}{[(n-\ell-1)+1]} (\mathcal{E}_\sigma - \mathcal{E}_\pi) \quad (\text{Equação 52})$$

Mas como é sabido que as ligações σ são mais fortes que as ligações π , então $\mathcal{E}_\pi = a\mathcal{E}_\sigma$, com o parâmetro a variando no intervalo $0 < a \leq 1$, o que resulta em (Equação 53):

$$BDE = \frac{(1-a)}{[(n-\ell-1)+1]} \mathcal{E}_\sigma \quad (\text{Equação 53})$$

na qual o parâmetro a pode ser ajustado para cada família. A (Equação 53) não pode descrever o comportamento de BDE da família dos gases nobres já que se observa um aumento de BDE ao longo da família. Isto não é observado para a família dos metais alcalino terrosos, no qual BDE tem um comportamento mais regular a partir da molécula de dicálcio Ca_2 . Estes sistemas que apresentam apenas configurações fechadas, sem elétrons desemparelhados, parecem apresentar uma contribuição de polarização em BDE, que deve ser proporcional ao número quântico principal da configuração de valência de maior energia do átomo analisado, já que quanto maior o átomo formador da molécula diatômica homonuclear, maior essa contribuição de polarização. De fato, essa contribuição será utilizada como αn , com α a constante de proporcionalidade. Desta forma,

$$BDE = \frac{(1-a)}{[(n-\ell-1)+1]} \mathcal{E} + \alpha n \quad (\text{Equação 54})$$

na qual $\mathcal{E}_\sigma$ foi substituído por $\mathcal{E} = KBDE(H_2)$. A constante K para a família dos metais alcalino terrosos e dos gases nobres é de $1/2$ e $4/3$ respectivamente. A constante de proporcionalidade α será mantida constante para ambas as famílias, sendo $\alpha = 1,00 \text{ kJ.mol}^{-1}$. O valor do parâmetro a foi ajustado para reproduzir os valores de BDE das duas famílias analisadas. Foram utilizados os valores $0,77064$ e $0,99656$ para as famílias 2 e 18 respectivamente, o que resulta em produtos $(1-a)\mathcal{E}$ iguais a $50,0 \text{ kJ.mol}^{-1}$ e $2,00 \text{ kJ.mol}^{-1}$. A variação de BDE calculada comparada com BDE experimental para as famílias 2 e 18 estão representadas na **Figura 100** e **Figura 101** em

que os pontos circulares vermelhos refletem os dados experimentais e os pontos triangulares azuis configuram a adoção de contribuição principal mais termo de polarização.

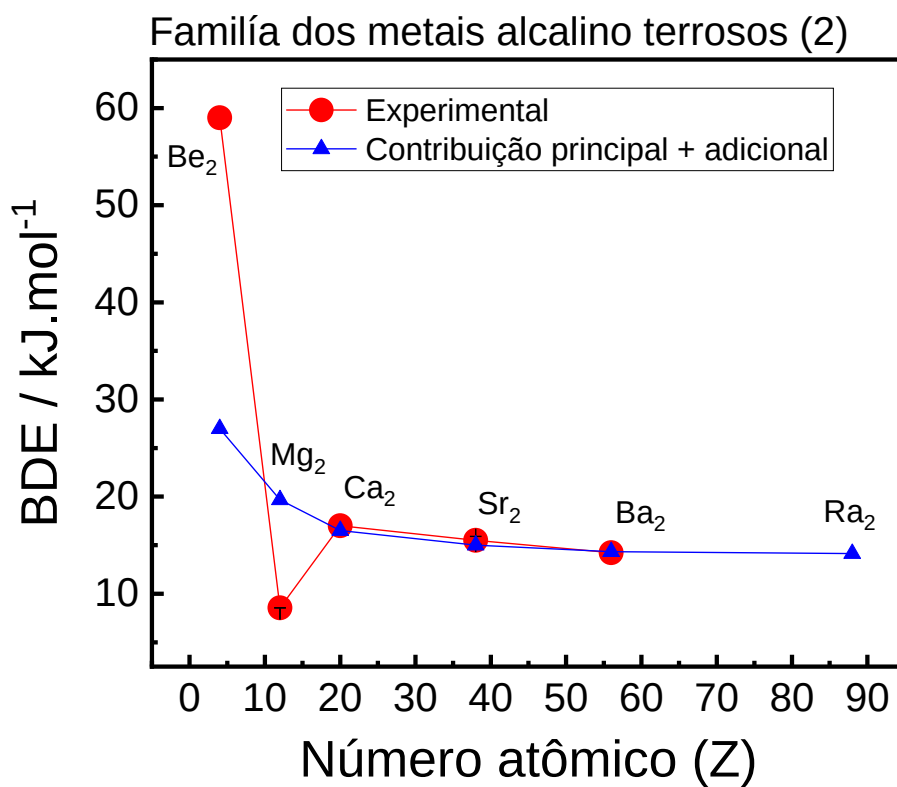


Figura 100 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de polarização para a família dos metais alcalino terrosos (2).

Fonte: Obra dos autores.

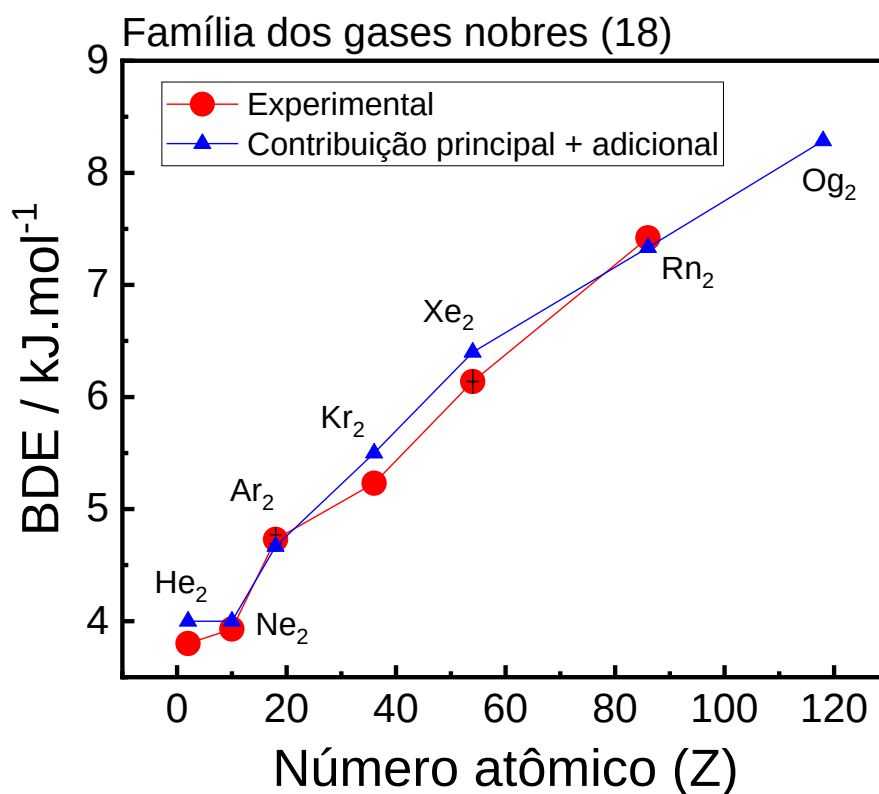


Figura 101 - BDE experimental e BDE calculada a partir das considerações de contribuição principal e contribuição principal mais termo de polarização para a família dos gases nobres (18).

Fonte: Obra dos autores.

Tabela 8. Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais termo adicional de polarização) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família dos metais alcalino terrosos (2).

Z ^a	X ₂	BDE Exp ^{b,c}	BDE ^{b,d}	Δ ^e
4	Be ₂	59	27	-54,24
12	Mg ₂	8,552	19,67	129,97
20	Ca ₂	17	16,5	-2,941
38	Sr ₂	15,5	15	-3,226
56	Ba ₂	14,22	14,33	0,797
88	Ra ₂		14,14	

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol⁻¹. ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE mais termo adicional de polarização. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

Na família dos metais alcalino terrosos há uma boa correlação dos valores experimentais de BDE com os valores calculados para as moléculas diatômicas homonucleares de dicálcio Ca_2 , di-estrôncio Sr_2 e dibário Ba_2 . O valor experimental de BDE para a molécula de dibário Ba_2 foi retirado de Cheng *et al* (2019). Apesar da falta de correlação nas moléculas de dibérbio Be_2 e dimagnésio Mg_2 , é observada uma ótima diferença percentual para os demais elementos formadores das moléculas X_2 , com seu valor médio igual a -1,79 %. Já para a família dos gases nobres a correlação entre BDE calculado e os valores experimentais de BDE é surpreendente. Toda a família é descrita com precisão, sendo a diferença percentual média igual a 2,32 %. Nota-se uma diferença de comportamento de BDE em relação ao número atômico. No caso dos gases nobres é observado um aumento de BDE ao longo da família, o que pode ser explicado pela igualdade na contribuição principal e no termo adicional de polarização, que tem um valor do parâmetro α elevado e um valor particularmente pequeno da constante α .

Tabela 9 - Valores experimentais e calculados (contribuição principal mais termo adicional de polarização) de BDE para as moléculas diatômicas homonucleares da família dos gases nobres (18).

Z^a	X_2	BDE Exp ^{b,c}	BDE ^{b,d}	Δ^e
2	He_2	3,8	4,00	5,26
10	Ne_2	3,93	4,00	1,78
18	Ar_2	4,73	4,67	-1,34
36	Kr_2	5,23	5,50	5,16
54	Xe_2	6,138	6,40	4,27
86	Rn_2	7,42	7,33	-1,17
118	Og_2		8,29	-

^aNúmero atômico do átomo formador da molécula diatômica homonuclear. ^bValores de BDE expressos em kJ.mol^{-1} . ^cValores experimentais de BDE retirados do Handbook. ^dContribuição principal a BDE mais termo adicional de polarização. ^eDiferença percentual (%) entre os valores de BDE calculados e os experimentais.

E quanto a inversão dos diagramas de orbitais moleculares?

Tomando a organização dos níveis de energia dos elementos químicos do segundo período da tabela periódica, o trabalho observou um comportamento peculiar entre as tríades B_2 , C_2 e N_2 com O_2 , F_2 e Ne_2 . Esse comportamento, conhecido como inversão σ - π dos elementos químicos do segundo período da tabela periódica é caracterizado por uma mudança na posição em energia dos orbitais moleculares 2σ e 2π ao se comparar as duas tríades.

A mudança ocorre, mais precisamente, entre os elementos nitrogênio e oxigênio, formadores de N_2 e O_2 . Uma maneira de compreender essa inversão consiste em considerar a energia dos orbitais. Mann, Meek e Allen (1989) organizaram essas energias de maneira a usá-las para a proposta de eletronegatividade. A partir da média de energia monoelétrica do subnível s é descrita a energia E_s . Assim, também é descrita uma energia E_p representativa dos elétrons em subnível p . Tais dados estão disponíveis e organizados em tabela através do *National Institute of Science and Technology* (NIST).

Essa peculiaridade é refletida por um aumento de energia que pode ser visualizado através da representação gráfica da **Figura 102**.

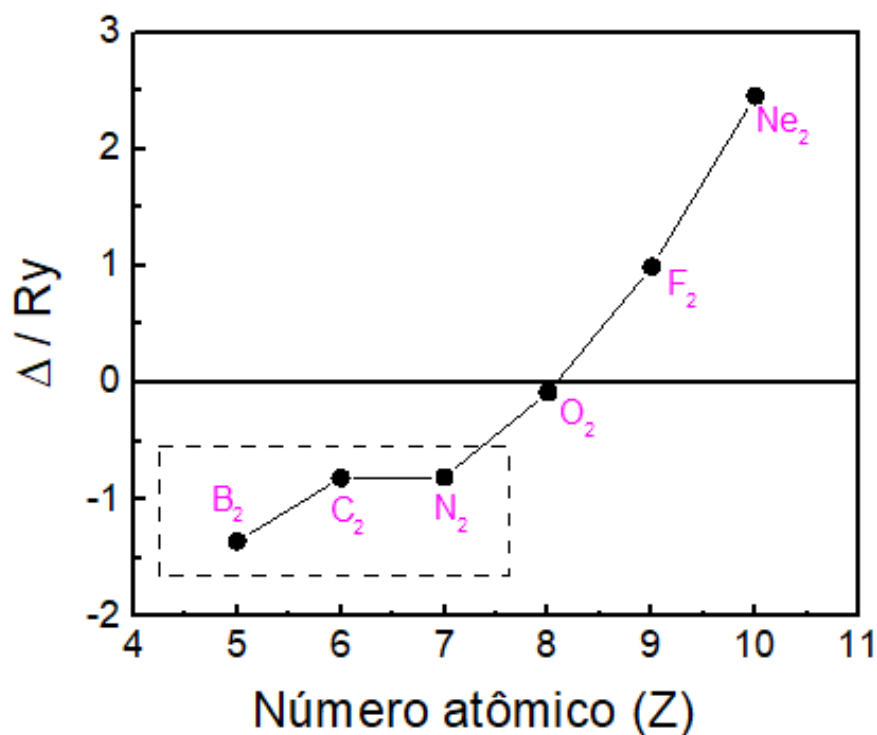


Figura 102 - Variação em energia das tríades do segundo período da tabela periódica.

Fonte: Obra dos autores.

A descrição dessa elevação, a qual remete a alguma diferença entre as tríades, é dada pela (Equação 56) usando os dados da energia dos orbitais s e p , descritas como Es e Ep , respectivamente, junto a quantidade de elétrons do subnível correspondente.

$$\Delta = (2. Es) - (np. Ep) \quad \text{(Equação 55)}$$

Como os elementos químicos das tríades contém 2 elétrons em subnível s , essa energia é multiplicada por essa mesma quantidade.

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.

MIessler, 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.

APÊNDICE

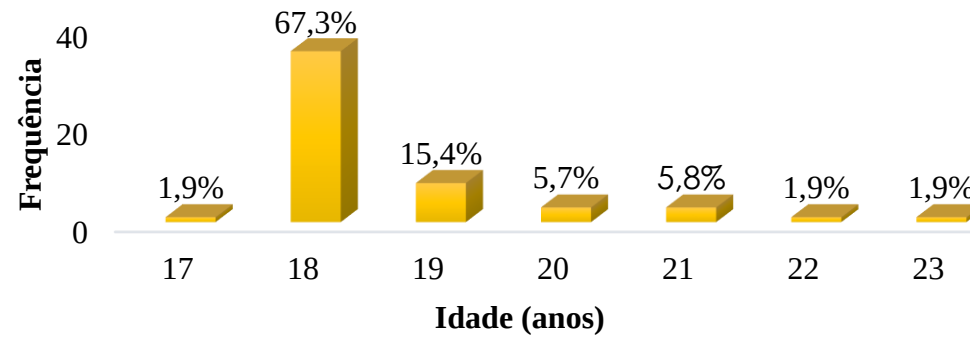
INSTRUMENTO PARA PLANEJAMENTO DE UNIDADE DIDÁTICA MULTIESTRATÉGICA (UDM)

IDENTIFICAÇÃO DO TRABALHO	
Instituição	Instituto de Química da UNESP – Araraquara (SP)
Curso	Programa de Pós Graduação do Instituto de Química
Disciplina	Doutorado em Química
Professor	Marco Aurélio Cebim
Autor(a) da UDM	Joana Souza Oliveira Galavotti
Data e versão da UDM	

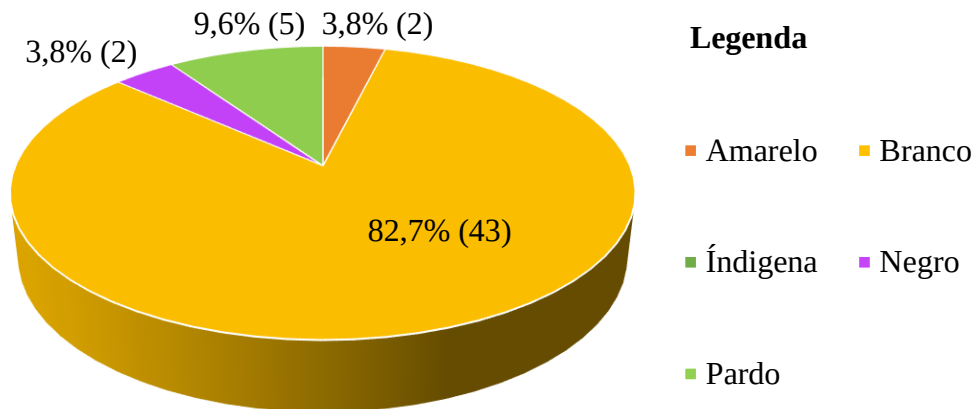
CONTEXTO DA INTERVENÇÃO DIDÁTICO-PEDAGÓGICA	
Nome da unidade escolar	Instituto de Química da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (Unesp).
Endereço completo	Avenida Professor Francisco Degni, nº 55. CEP: 14800-060. Bairro: Jardim Quitandinha. Cidade/Estado: Araraquara (SP).
Site e e-mail	Site: https://www.iq.unesp.br/ Telefone para contato: (16) 3301-9500
Caracterização da unidade escolar	Araraquara é uma cidade interiorana do Estado de São Paulo pertencente a região de influência de Ribeirão Preto. Conforme os dados mais recentes do IBGE (Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística), Araraquara possui uma população estimada em 240.542 habitantes. Em aspectos econômicos, o Índice de Desenvolvimento Humano Municipal (IDHM) foi de 0,815 em 2010, o Produto Interno Bruto per capita (PIB) foi de R\$ 44.813,53 em 2020 e a renda média mensal dos trabalhadores formais era de 2,5 salários-mínimos para o mesmo ano. A taxa de escolarização em 2010 atingiu 98,7% para a faixa etária de 6 a 14 anos. O IDEB (Índice de Desenvolvimento da Educação Básica) em 2021 indicou que para o Ensino Médio, a cidade atingiu o índice 4,7, superando a meta de 4,4. Já para o Ensino Fundamental as metas não foram atingidas em 2021. Para os anos iniciais do Ensino Fundamental, o valor atingido foi de 6,3 quando a meta era de 7,2 e para os anos finais o alcance foi de 5,4 quando o projetado era de 6,6. O Instituto de Química da UNESP de Araraquara parte do esforço de professores, cientistas e servidores que acreditaram ser possível a criação de cursos com qualidade, que até então concentravam-se na capital, em regiões interioranas. Além da implementação de cursos de qualidade no interior do Estado, a falta de professores de Química motivara a elaboração da Faculdade de Química em Araraquara. Por meio do decreto Nº 48.906 de agosto de 1960, assinado pelo Presidente Juscelino Kubitschek, permitiu-se a criação do Curso de Química que iniciou as atividades no ano seguinte. As atividades ocorriam no departamento de Química da Faculdade de Filosofia Ciências e Letras no centro de Araraquara. Em 1964 novas instalações abrigaram o Curso, transferindo-o para o Jardim Quitandinha fundado em 1950 e ainda com pouca infraestrutura. Em 1976 surge a Universidade Estadual Paulista através da Lei Estadual Nº 952. Atualmente, o Instituto de Química (IQ) oferece cursos de graduação e programas de pós-graduação, além de projetos de extensão. Na área da graduação são ofertados em período integral o Bacharelado em Química (BQ), Bacharelado em Química Tecnológica (BQT) e a Engenharia Química (EQ) e no período noturno a Licenciatura em Química (LIC). Essas modalidades são acessadas via vestibular anual em que o Bacharel em Química disponibiliza 50 vagas, a Engenharia conta com 40 vagas e a Licenciatura possui 30 vagas. Ao final do segundo ano letivo do Bacharelado, através de processo seletivo interno, os alunos optam pela continuidade do BQ ou para a adoção ao BQT. Dessa maneira, são oferecidas 25 vagas diretas ao BQT e mais 15 vagas para reingresso, totalizando 40 vagas. A pós-graduação conta com

	programas stricto sensu de Biotecnologia, Química e o Profqui (Programa de Mestrado Profissional em Química em Rede Nacional) e em modo lato sensu foi criado, recentemente, o curso de Tecnologia Cervejeira. A infraestrutura geral do Instituto conta com 1 anfiteatro central, 1 biblioteca, 1 cantina, 1 copa, 11 salas de aula, 2 laboratórios didáticos de informática, 1 laboratório didático de mineralogia, 1 prédio para laboratórios didáticos de química e sala de videoconferência. Há laboratórios e salas voltadas aos departamentos de Bioquímica e Química Orgânica, Engenharia, Física e Matemática e Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica, espaços administrativos, de manutenção e apoio. O IQ abriga também laboratórios disponíveis a pesquisadores de instituições brasileiras mediante agendamento. No terceiro andar do prédio principal atua o cursinho popular Cuca (Cursinho Unificado do Campus de Araraquara) vinculado à Unesp com oferta de aulas no período noturno.
Disciplina	Química Fundamental e Química Inorgânica.
Ano/turma	1º ano do Bacharelado em Química e 1º ano da Engenharia Química.
Professor responsável	Marco Aurélio Cebim (marco.cebim@unesp.br).
Número de estudantes	56 alunos matriculados (Bacharel) e 40 alunos matriculados (Engenharia).
Caracterização dos estudantes	Em formulário via <i>Google</i> os estudantes foram convidados a responder: Qual sua idade? Como você se autodeclara (amarelo, branco, indígena, negro, pardo, outro)? Em que escola você estudou antes do IQ (pública, pública com ensino técnico, particular, particular com bolsa, do campo)? Você fez curso técnico? Com quem você mora em Araraquara? Você possui um ambiente adequado de estudos em sua residência? Desse levantamento, foi possível traçar os seguintes gráficos que indicam a caracterização estudantil:

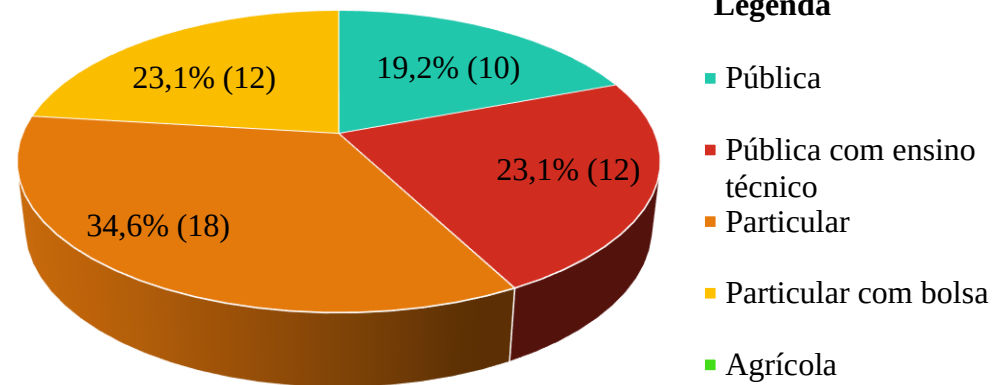
**Idade dos estudantes da turma de Bacharel em Química
(2023)**



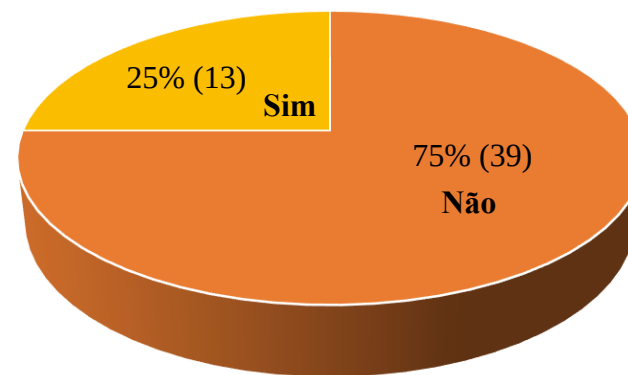
Autodeclaração de cor



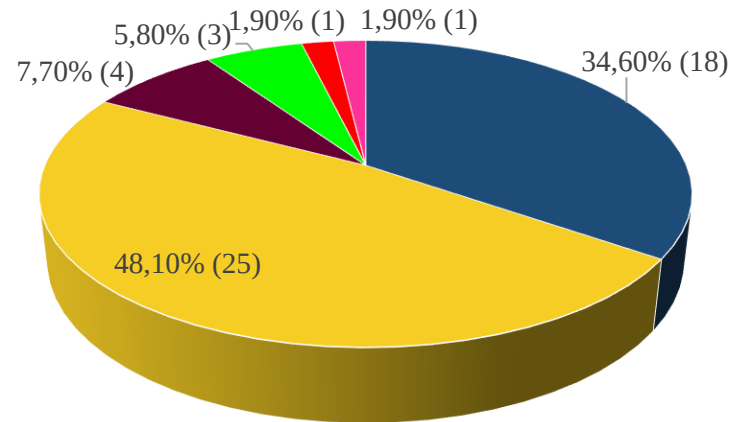
Origem escolar



Possui Ensino Técnico?



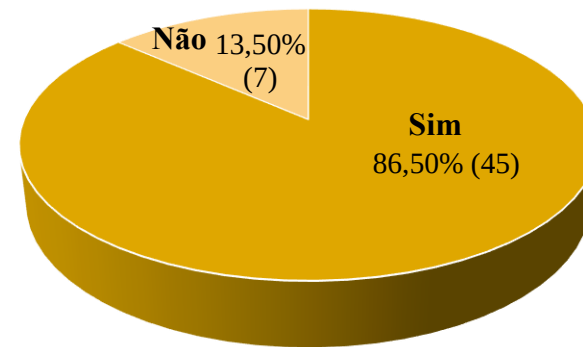
Como você mora em Araraquara?



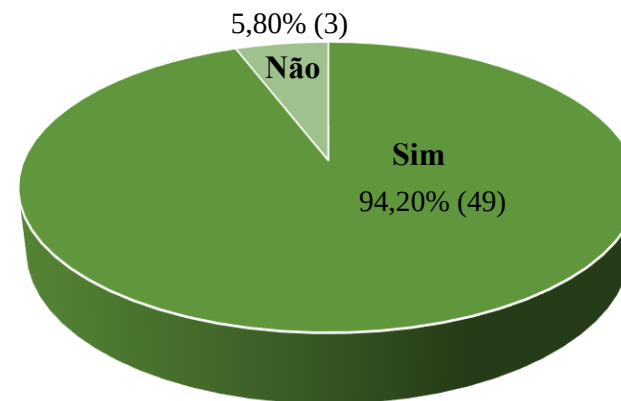
Legenda

- Sozinho
- Com amigos (em república, casa ou apartamento)
- Com a família
- Com a família, mas em uma cidade vizinha
- Com colegas da Universidade na moradia estudantil
- Outro

Há um ambiente adequado de estudos em casa?

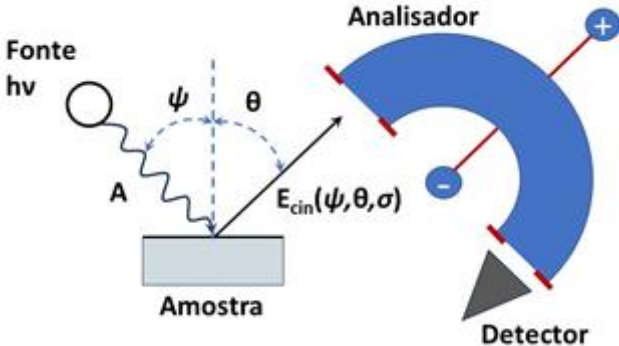


Você precisa trabalhar para se manter em Araraquara?



ANÁLISE CIENTÍFICO-EPISTEMOLÓGICA

Conteúdo programático da UDM	Teoria do Orbital Molecular (TOM) - Modelos; - Ligação química covalente; - Breve histórico da Teoria do Orbital Molecular; - Orbital Molecular; - Diagramas de orbital molecular para espécies diatômicas homonucleares; - Diagramas de orbital molecular para espécies diatômicas heteronucleares.
Pré-requisitos para a UDM	Antes desse conteúdo é necessário que os alunos tenham visto: - Distribuição eletrônica; - Propriedades periódicas (energia de ionização, afinidade eletrônica, eletronegatividade); - Ligação química (iônica, covalente, metálica); - Estruturas de Lewis; - Ressonância; - Força de ligação; - Comprimento de ligação; - Teoria da Ligação de Valência (TLV); - Orbitais; - Ligações sigma e pi; - Hibridização.
Orientações curriculares oficiais sobre o tema	O Parecer CNE/CES 1.303/2001, de 4 de dezembro de 2001, estabelece as diretrizes curriculares para os cursos de Bacharelado e Licenciatura em Química. O parecer descreve o que é esperado como perfil dos formandos em cada curso, as competências e habilidades a serem desenvolvidas, a estrutura geral do curso, os conteúdos curriculares básicos, específicos e complementares. Segundo o Parecer CNE/CES 1.303/2001, o estudante do Bacharelado em Química deve ser capaz de: - Compreender os conceitos, leis e princípios de Química; - Conhecer as propriedades físicas e químicas principais dos elementos e compostos químicos que possibilitem entender e prever o seu comportamento físico-químico e aspectos de reatividade, mecanismos e estabilidade; - Reconhecer a Química como uma construção humana e compreendendo os aspectos históricos de sua produção e suas relações com os contextos culturais, socioeconômico e político. Dos conteúdos curriculares básicos em Química almeja-se que o Bacharel atenda, de acordo com o Parecer CNE/CES 1.303/2001, as seguintes temáticas:

	- Propriedades físico-químicas das substâncias e dos materiais; - Estrutura atômica e molecular; - Análise química (métodos químicos e físicos e controle de qualidade analítico); - Termodinâmica química; - Cinética química; - Estudo de compostos orgânicos; - Organometálicos; - Compostos de coordenação; - Macromoléculas e biomoléculas e - Técnicas de básicas de laboratório.
Conteúdos conceituais - Identificação dos fatos e/ou fenômenos de interesse (aspecto fenomenológico) - Interpretação dos fatos ou fenômenos de interesse (aspectos teórico e simbólico)	- Aspecto fenomenológico A espectroscopia de fotoelétrons atua como uma comprovação experimental do fenômeno da ligação química, sendo possível indicar a quantidade de energia a ser fornecida ao sistema para remoção de elétrons.  Fonte: Adaptado de Dias e Anjos (2021). - Aspecto teórico A combinação de orbitais atômicos leva à formação dos orbitais moleculares. Uma combinação que reforce o aumento da densidade eletrônica entre os núcleos atômicos pode ser entendida como um fenômeno de interferência do tipo construtivo. Já a diminuição da densidade eletrônica nessa combinação pode ser interpretada como um fenômeno de interferência destrutivo. Os orbitais moleculares são produzidos considerando as três dimensões (eixos x, y, z).

Orbitais moleculares do tipo ligantes, antiligantes e não ligantes são gerados das combinações de orbitais atômicos, cada qual com suas singularidades.

Pelos orbitais moleculares estão distribuídos os elétrons, assim essas entidades pertencem à molécula.

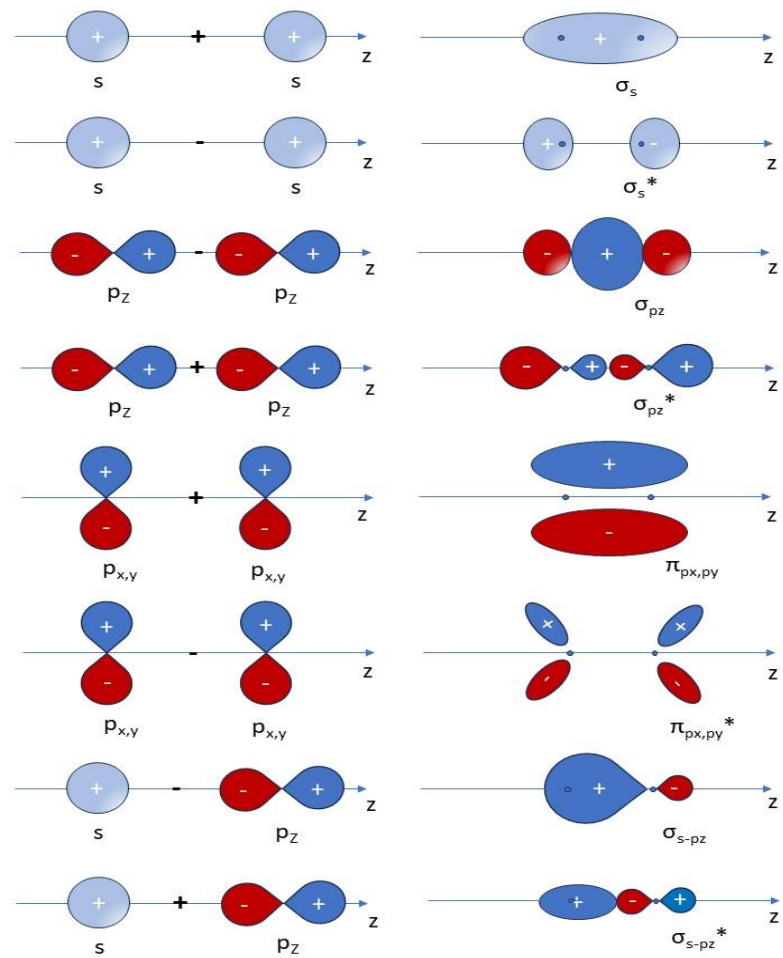
Os orbitais moleculares seguem uma ordem de energia. Essa ordem de energia pode variar entre o grupo dos átomos leves que originam as moléculas diatômicas homonucleares (B_2 , C_2 e N_2) e os átomos pesados que originam as seguintes moléculas (O_2 , F_2 e Ne_2).

Ordem de ligação, existência da molécula e força de ligação.

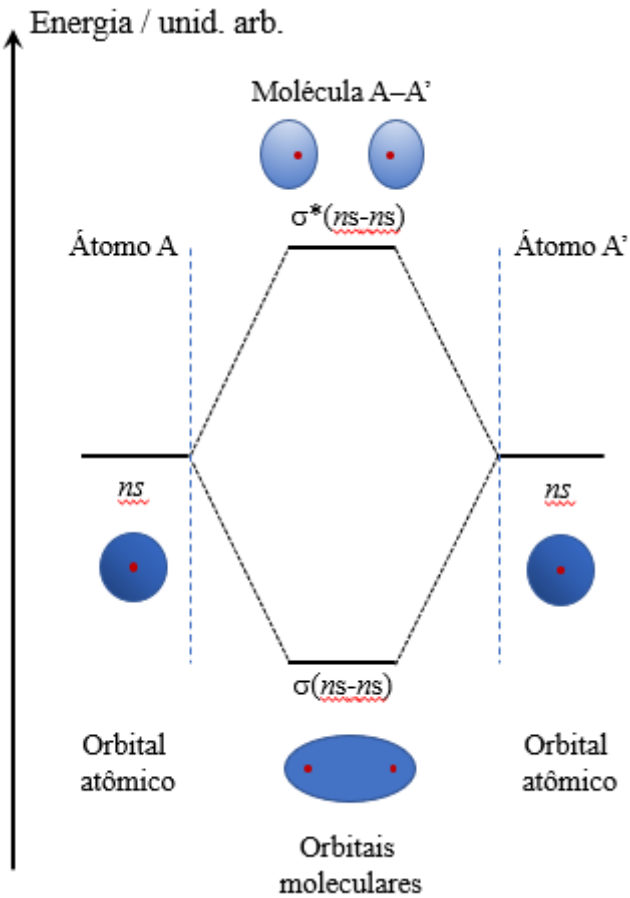
- Aspecto representacional

As representações químicas acerca da TOM são:

- $\sigma = \psi_{1s} + \psi_{1s}$
- $\sigma^* = \psi_{1s} - \psi_{1s}$
- $OL = \frac{(n. \text{elétrons ligantes} - n. \text{elétrons antiligantes})}{2}$



Fonte: Adaptado de Barros (1992).

	 Diagrama de níveis de energia para a formação de orbitais moleculares σ a partir de dois orbitais atômicos ns. O eixo vertical representa a energia em unidades arbitrárias (Energia / unid. arb.). Dois átomos, Átomo A e Átomo A', possuem orbitais atômicos ns (representados por círculos azuis) em um nível de energia intermediário. Quando os átomos se aproximam para formar a molécula A-A', os orbitais atômicos se combinam para formar dois orbitais moleculares: - Um orbital molecular de ligação $\sigma(ns-ns)$ em um nível de energia inferior ao dos orbitais atômicos. - Um orbital molecular antiligação $\sigma^*(ns-ns)$ em um nível de energia superior ao dos orbitais atômicos. Os orbitais moleculares são representados por elipses azuis no topo e no fundo do diagrama. Fonte: Obra dos autores.
Perfil conceitual ou desenvolvimento histórico do conceito principal da UDM	Como trata Martins (2021), a mecânica quântica teve início em 1900 com as contribuições de Planck sobre a radiação do corpo negro, entretanto, o desenvolvimento propriamente dito ocorreu entre 1925 e 1926 apoiado em Pauli, Born, Dirac, Heisenberg, Schrödinger, entre outros. A Teoria do Orbital Molecular (TOM) surge ao final da década de 1920 e em seu desenvolvimento consideramos descrever brevemente alguns grandes marcos que a sustentam.

Ao final do século XIX, os estudos sobre as radiações eletromagnéticas encontravam-se em evidência. A radiação do corpo negro consistia em um desafio para a Física Clássica. O corpo negro ideal é um objeto capaz de absorver toda a radiação eletromagnética nele incidente. Um objeto com características próximas as de um corpo negro consiste em um forno, isolado termicamente, revestido internamente de material metálico e com um pequeno orifício para o meio externo (STUDART, 2000). Toda a radiação nele incidente através do orifício é refletida em seu interior. Ao ser aquecido, o corpo negro emite a radiação eletromagnética dentro de si, reabsorvendo-a continuamente e apenas uma parte dessas emissões escapa pelo orifício originando um largo espectro contínuo de frequências (STUDART, 2000). Só que à medida que a temperatura aumenta a quantidade de energia emitida pelo objeto também se eleva, deslocando a intensidade da radiação emitida para comprimentos de onda mais curtos. Então, esperava-se que para comprimentos de onda baixos, a intensidade da radiação emitida tenderia ao infinito. Dessa maneira, um objeto muito quente emitiria radiações muito altas o que não é condizente, gerando o problema da “catástrofe do ultravioleta”. Assim, não havia restrição da quantidade de energia a ser transferida entre corpos (ATKINS; JONES, 2012). Em 1900, o físico alemão Max Planck propôs outra maneira de tratar a transferência de energia. Planck ponderou que quando uma radiação de frequência ν é gerada por um oscilador, por exemplo, deve haver uma energia mínima para que ele oscile. Assim, não é em qualquer temperatura que haverá energia suficiente para oscilação. Levando essa ideia para o sistema atômico, os átomos do material do corpo negro podem emitir ou absorver radiação eletromagnética em determinadas frequências, ou seja, para haver troca de energia entre o átomo e o ambiente externo há uma frequência característica. Logo, Planck propôs uma equação para a transferência de energia E entre um sistema atômico e a vizinhança: $E = h \cdot \nu$ em que h é a constante de Planck igual a $6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ e ν é a frequência. Portanto, a energia é transferida em pacotes e não da forma contínua como a Física Clássica tratava. Assim, não haveria uma catástrofe do ultravioleta (ATKINS; JONES, 2012).

O efeito fotoelétrico descrito por Albert Einstein corrobora com a quantização de energia de Planck. Einstein observou que elétrons poderiam ser ejetados de um metal em determinadas frequências de radiação ultravioleta incidente. Experimentalmente, o cientista notou que nenhum elétron era ejetado até que um valor característico de frequência da radiação fosse atingido, tal valor ainda dependeria do metal submetido ao teste. Atingindo-se a frequência necessária, os elétrons eram ejetados. Caso se aumentasse o valor da frequência da fonte de radiação, a energia dos elétrons ejetados aumentava também. Einstein ampliou as ideias anteriores levando ao entendimento que a luz é composta por *quantum* de luz seguindo a equação de energia de Planck.

Naquela época o modelo atômico de Ernest Rutherford descrevia um pequeno núcleo com cargas positivas rodeado por uma zona de cargas negativas. Tal modelo falhava em relação às propriedades físicas e novas modificações deveriam surgir para explicar a existência da matéria. A partir das leis vigentes da física clássica

aplicadas ao sistema microscópico atômico, o núcleo positivo e a zona negativa deveriam se chocar. Além disso, ao considerar o elétron movimentando-se em torno do núcleo, em distância fixa e em um movimento circular uniforme, espera-se que haja emissão de energia por parte do elétron, diminuindo a distância desse para o núcleo e ocasionando a colisão. Porém, isso não ocorre. Então, como realizar a leitura do mundo atômico?

Niels Bohr aplicou a quantização de energia ao átomo de hidrogênio. Com isso, o movimento dos elétrons se dava em órbitas e essas eram quantizadas. Por este modelo, o elétron não absorveria ou emitiria energia em órbitas chamadas órbitas permitidas, mas manteria sua energia constante. Essas órbitas foram quantizadas pelo momento angular do elétron, dado como L . Desse modo, as órbitas permitidas são as que possuem o momento angular do elétron quantizado em múltiplos inteiros como dado na expressão $L = n \cdot \frac{h}{2\pi}$, em que n corresponde a um número quântico diferente de zero e h é a constante de Planck. A absorção e emissão de energia é equivalente a diferença de energia entre duas órbitas. Nota-se o quão importantes são os estudos de Planck e Einstein que colaboraram para a proposta de um novo modelo atômico para a época.

A definição de ligação química por Gilbert Newton Lewis veio pouco tempo após o modelo atômico de Bohr, embora suas ideias já aparecessem em rascunhos de 1902. Lewis explica que combinou as ideias teóricas sobre o elétron com as leis periódicas que estudava para alguns elementos químicos (LEWIS, 2016). Dessa combinação, surgiu a proposta de que a organização dos elétrons em um átomo segue o arranjo de um cubo concêntrico. O químico falava também sobre a possibilidade de determinados átomos cederem elétrons a outros para que esses completassem o cubo com 8 elétrons nos vértices (LEWIS, 2016). Da sua teoria surge o que é chamado de octeto alguns anos depois, pois o átomo tenderia a ter 8 elétrons na camada de valência – distribuídos pelo cubo concêntrico (FILGUEIRAS, 2016).

Dessa forma, surge a designação de ligação química como o compartilhamento de pares eletrônicos entre dois núcleos atômicos. Lewis utilizou o modelo do átomo cúbico para expor a ideia de ligação através dos elétrons das camadas de valência dos átomos. Na representação do modelo do átomo cúbico, os elétrons ocupam os vértices da figura e as arestas simulam a ligação entre eles (LEWIS, 2016). Desse modo, Lewis sugeriu a representação da ligação química a partir do uso de dois pontos que retratassem os dois elétrons que fazem a conexão entre os átomos. Sua teoria de ligação química impulsionou o desenvolvimento de outras teorias para explicação de uma infinidade de compostos químicos como a Teoria de Ligação de Valência (TLV), (PEREIRA *et al.*, 2017). Esse desenvolvimento foi bem-visto por Lewis. Em um de seus trabalhos, o professor revela que algumas respostas à teoria do compartilhamento não eram possíveis na época devido a inconsistência dos meios da Física clássica em explicar a existência de átomos com base em entidades positivas e negativas. Tornava-se necessário o aprofundamento de técnicas capazes de auxiliar o entendimento dessas entidades. Isso foi possível

devido ao avanço da mecânica quântica com contribuições valiosas de Walther Heitler e Fritz London e dos estudos de Wolfgang Pauli.

Wolfgang Pauli foi responsável por aprimorar a física quântica aplicada aos elétrons. Até então, os dados empíricos não eram justificáveis somente com as leis da física clássica e, muitas vezes, inconclusiva com a recente física quântica. Como mencionado, Bohr havia imposto a quantização das órbitas pelo momento angular do elétron (L) para justificar a estabilidade da existência atômica. Já Arnold Sommerfeld introduziu momentos magnéticos relacionados ao movimento em torno de seu próprio eixo (S – momento angular de spin) e em sua órbita (L – momento magnético orbital). Nessa introdução, o elétron se moveria em órbitas elípticas em torno do núcleo. Essas introduções ainda não explicavam inteiramente os espectros atômicos até Pauli sugerir que dois elétrons deveriam ser encontrados em uma mesmo orbital com um conjunto diferente de números quânticos. Desse modo, o Princípio de Exclusão de Pauli organiza os estados dos elétrons em um mesmo orbital de forma que eles não possuam exatamente o mesmo conjunto de números quânticos (PEIERLS, 1960).

Outro grande responsável pelos avanços químicos foi o de Louis De Broglie. De Broglie escreveu três notas sobre a mecânica ondulatória em 1923. Embora, em 1907, Johannes Stark houvesse associado uma frequência ν_0 a um elétron em repouso, De Broglie entendeu que havia duas frequências diferentes para uma partícula em movimento. Uma delas representava a oscilação da própria partícula e a outra estava associada a uma onda que acompanhava o movimento. A partir de suas deduções, De Broglie sugeriu que o movimento dos elétrons, de forma unidimensional, teria uma onda associada. A argumentação matemática de De Broglie levou ao entendimento que toda partícula, com massa m e velocidade v , teria um comprimento de onda (λ) associado (ROSA, 2004). Voltando ao átomo de Bohr, as órbitas eram comparadas as oscilações de onda estacionária dos elétrons, assim os números inteiros surgiram de condições ondulatórias. A proposta de comportamento ondulatório associado a uma partícula recebeu influência da teoria de Planck.

Entre 1925 e 1926, Erwin Schrödinger formulava uma equação descritiva do movimento de um elétron dando base à toda mecânica quântica (MARTINS, 2021). Schrödinger trouxe a equação de onda através dos estudos de De Broglie em que uma onda era associada a uma partícula. No modelo de De Broglie as partículas teriam velocidade constante, logo havia uma limitação de movimento. O desafio para Schrödinger advinha de prever o comportamento de uma partícula com forças atuantes sobre ela. Durante um seminário na Escola Politécnica de Zurich, Peter Debye sugeriu que as ondas de De Broglie deveriam ser estudadas por meio de equações de onda. Schrödinger passou a traçar equações de onda que fossem satisfatórias com os preceitos de De Broglie. Em torno de 6 meses, o físico publicou 6 trabalhos sobre a mecânica ondulatória.

Schrödinger foi consistente com as relações de De Broglie como $\lambda = \frac{h}{p}$; $v = \frac{\epsilon}{h}$; $\omega = 2\pi\nu$ e $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ para descrever o estado de uma partícula por uma onda $\Psi(x, t)$. Assim, diferentes funções $\Psi(x, t)$, devem estar associadas a

diferentes estados da partícula e a equação de movimento regida por $\Psi(x, t)$ deve ser capaz de determinar o estado seguinte dado seu estado inicial $\Psi(x, t)$ e as forças que agem sobre ela. A equação deve ainda ser linear em Ψ , pois $\Psi_1 + \Psi_2$ são soluções que remetem a interferências entre ondas. Além do momento e do comprimento de onda basearem a descrição junto a condições da equação, Schrödinger adotou a conservação de energia, assumindo que para um sistema atômico, a energia total é igual à somatória das energias cinética e potencial. A equação de Schrödinger, dependente do tempo e espaço, apresentada no último trabalho publicado de 1926 é apresentada abaixo:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \cdot \psi(x, t) = \frac{i\hbar \partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

Nota-se que a função de onda (Ψ) possui então duas partes: uma parte real $O(x, y, z)$ e uma parte complexa (Ψ). Isso levaria a suposição por Max Born de que o módulo do quadrado da função de onda ($\Psi \cdot \Psi^*$) representaria a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula associada a uma função de onda no espaço. As quantizações arbitrárias dos números quânticos nos modelos de Bohr e Sommerfeld foram aparecendo nas deduções matemáticas de Schrödinger, pois o autor aplicou a equação a um átomo de hidrogênio baseando os cálculos em modos estacionários de uma corda em vibração. Ademais, como comentado anteriormente, pelas funções de onda surgem as possibilidades de interações construtivas e destrutivas. Por fim, é relevante destacar que todos esses avanços marcaram a mecânica ondulatória como uma nova maneira de olhar o mundo em termos de probabilidade e, não mais, de forma determinística.

Werner Heisenberg foi outro grande cientista responsável pelo avanço da mecânica quântica através do Princípio da Incerteza (PEIERLS, 1960). Pelo Princípio da Incerteza, é impossível determinar com exatidão medidas simultâneas de duas grandezas diferentes (ATKINS; JONES, 2012). Logo, a velocidade e a posição de um elétron não podem ser determinadas com exatidão simultaneamente. Consequentemente, não se pode determinar um caminho ou uma órbita específica para o elétron. O que se pode indicar são regiões em torno do núcleo atômico em que há maior probabilidade de encontrar um elétron, ou seja, Heisenberg rompeu com a visão de órbita definida para o movimento do elétron (advinda de Bohr) para a noção probabilística de posição do elétron. Isso reforça a noção probabilística de Schrödinger e Born com a densidade de probabilidade.

A Teoria do Orbital Molecular (TOM) procede a Teoria da Ligação de Valência (TLV). A teoria do compartilhamento de pares de elétrons fomentou as pesquisas em torno da ligação química, pois os cientistas buscavam compreender como duas espécies até então neutras constituíam uma ligação. Em 1927, os físicos alemães Walter Heitler e Fritz London publicaram um trabalho intitulado “*Interaction Between Neutral Atoms*

and Homopolar Binding According to Quantum Mechanic” em que descreveram a molécula de hidrogênio com base na mecânica quântica. Os cientistas estudaram, teoricamente, a aproximação de dois átomos de hidrogênio neutros no estado fundamental a uma distância “ r ” entre os núcleos atômicos (HEITLER; LONDON, 1927). Os autores propuseram uma equação de onda para o sistema considerando que os elétrons pertencem aos átomos em ligação (HEITLER; LONDON, 1927). Ao longo do desenvolvimento da equação, estabeleceram que havia uma “degenerescência dupla” que seriam os caminhos que o elétron pode ser representado no átomo. Assim, para um átomo A e um átomo B, tem-se que: o elétron (A) pertence oras ao átomo A e oras ao átomo B, enquanto o átomo B possui um elétron B que também pertence em um momento ao átomo A e em outro ao átomo B (HEITLER; LONDON, 1927). Os autores destacaram que os elétrons em questão trocam de posição, mas possuem a mesma energia em sistemas diferentes de autofunção (HEITLER; LONDON, 1927). Dessa descrição advém o comportamento da aproximação de dois átomos em termos de energia potencial. Heitler e London (1927) traçaram as soluções que retratassem as interações energéticas de dois átomos de hidrogênio. Dessas interações, partem o que atualmente se estuda sobre atração e repulsão de átomos em que é possível determinar o comprimento e a energia de ligação. Segundo Hiberty, Volatron e Shaik (2008), Heitler e London usaram os princípios de funções de onda para explicar uma ligação covalente. Nessa descrição, pode-se interpretar que os físicos consideraram estruturas iônicas ou contribuições iônicas na formação de ligações covalentes.

Conforme Sutcliffe (1996), Linus Pauling vai além e utiliza o contexto dos cálculos de Heitler e London para sobreposição de orbitais, ou seja, de funções de onda. Linus Pauling, apresentou a ideia de hibridização de orbitais a partir da sobreposição desses por meio da mecânica quântica. Por conseguinte, surge a TLV como uma teoria mecânico quântico na descrição de ligações químicas em sistemas poliatômicos a partir do aprofundamento de Pauling e John Slater. Ambos publicaram em 1931, a primeira imagem de ressonância para o benzeno e desenvolveram ainda mais as noções de hibridização, superposição e geometria molecular (HIBERTY; VOLATRON; SHAIK, 2008). A TLV é amplamente usada pela facilidade no tratamento de ligação química ao associar as combinações de funções de onda, entretanto, apresenta algumas limitações que instigaram uma certa rivalidade com a TOM de acordo com Pereira *et al.* (2017). Segundo os autores, a TLV passou por um momento de estagnação conceitual que culminou na fragilidade da teoria em certos aspectos, tais como a tratativa de fenômenos magnéticos e de estado excitado e a contínua necessidade em recorrer a hibridização. Tais desvantagens impulsionaram um uso crescente da TOM.

A TOM surgiu ao final da década de 1920 a partir da dedicação de Robert Mulliken e Friedrich Hund e de relevantes contribuições de John Lennard-Jones e Edward Condon. O surgimento da TOM se dá em um contexto em que a teoria de ligação química antecessora – a TLV – não era facilmente aplicada a sistemas moleculares de maior extensão e, anos mais tarde, forneceu dificuldades a adaptação em cálculos computacionais (MURRELL,

2011). Por sua vez, a TOM atua matematicamente com aproximações que facilitam os cálculos e entregam resultados coerentes com os sistemas moleculares, auxiliando a compreensão das estruturas eletrônicas moleculares conforme explica Murrell (2011). Ademais, a TOM complementa a TLV ao explicar fenômenos magnéticos e de estado excitado, como também absorve moléculas com número ímpar de elétrons que, até então, não faziam muito sentido.

Hund colaborou com a área da Química ao propor regras para o entendimento de espectros atômicos. Em seus estudos, o cientista assumiu que os elétrons circundam os núcleos, estabilizando a molécula a partir dessa troca entre os orbitais e trouxe o que, mais tarde, chamaríamos propriamente de orbitais (MURRELL, 2011).

Mulliken também trabalhou com espectroscopia e usou a antiga teoria quântica para interpretar espectros de moléculas diatômicas (MURRELL, 2011). O químico observou semelhanças entre alguns espectros e reconheceu o desenvolvimento da velha teoria quântica com as contribuições de Hund como fundamentais para a compreensão de estruturas moleculares, conforme Murrell (2011). Mulliken e Hund correlacionaram os estados de uma molécula diatômica observando a união e separação dos átomos constituintes e, posteriormente, Mulliken introduziu a nova mecânica quântica no estudo de moléculas poliatômicas. Mulliken foi responsável pela proposição do termo “orbital” em que o definiu como uma função de onda para um elétron de um átomo ou molécula (MURRELL, 2011). Ademais, classificou os orbitais como ligantes, antiligantes e não ligantes. De Heisenberg, Mulliken popularizou a relação de ligações de valência conhecida como ordem de ligação (MURRELL, 2011).

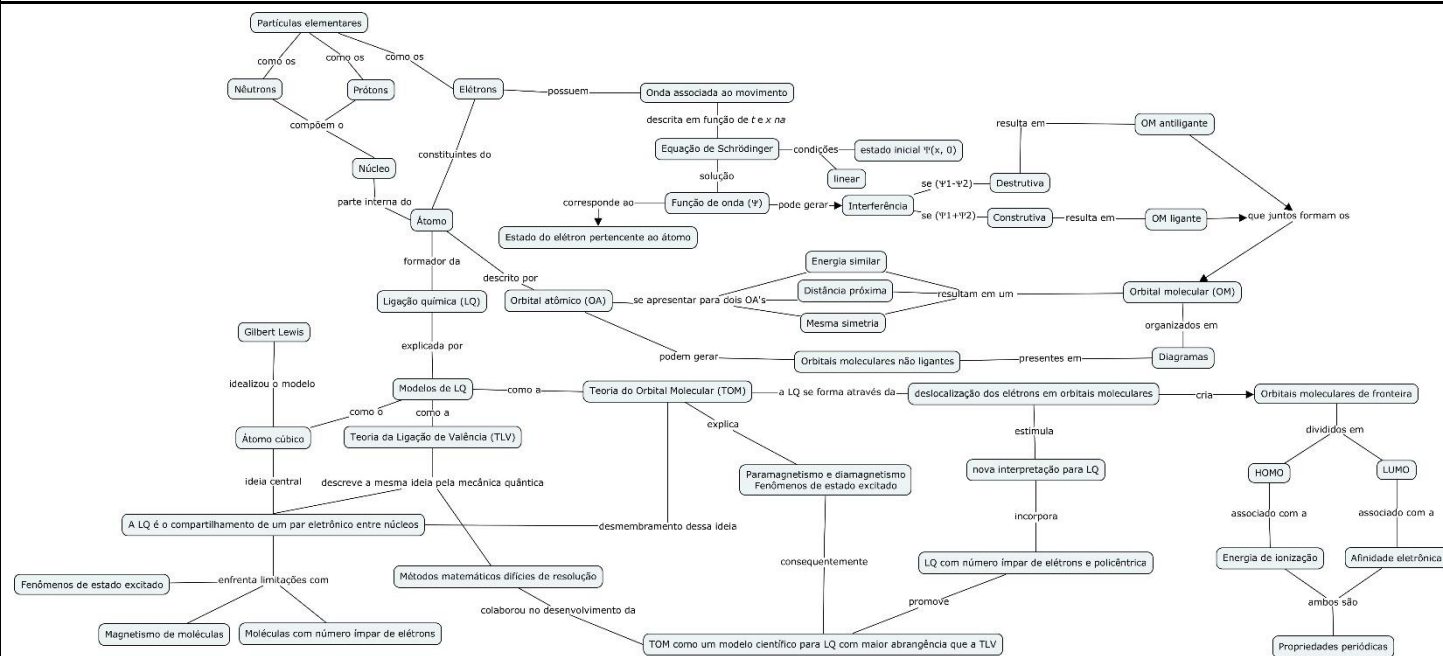
A melhor abordagem para moléculas poliatômicas – até então, um grande obstáculo para determinação naquela época – partiu de um método de cálculo chamado “Combinação linear dos orbitais atômicos (CLOA)”. Essa combinação linear parte de uma proposta de representar um orbital molecular para um elétron através da expansão em termos de funções específicas das quais uma função de onda é definida pelo conjunto de coeficientes dessas funções (MURRELL, 2011). O conjunto de funções de onda mais comum para a expansão são aquelas funções centradas em átomos da molécula usando a prerrogativa de núcleo parado (MURRELL, 2011). As funções de onda obtidas para a molécula devem ser parecidas com as funções de onda do átomo e esse método de combinação dos orbitais atômicos é o que permite obter os orbitais moleculares.

Lennard-Jones foi o primeiro a usar a CLOA de forma bastante similar aos dias de hoje e percebeu que o modelo anterior adotado pela TLV não poderia descrever os fenômenos magnéticos (MURRELL, 2011). Para um conjunto de moléculas diatômicas homonucleares, Lennard-Jones organizou um conjunto de funções de onda de orbitais moleculares pela soma e diferença das funções de onda atômicas classificadas com o mesmo número

quântico. Anos mais tarde, para moléculas diatômicas homonucleares, os cálculos de energia para os orbitais moleculares foram determinados em função das distâncias internucleares. As interpretações qualitativas, conhecidas atualmente por meio dos diagramas de orbital molecular, vieram dos estudos de Lennard-Jones em comparar as interações de energia dos orbitais moleculares em relação as energias dos orbitais atômicos dos átomos separados.

Já Edward Condon calculou, pela primeira vez, a energia de orbital molecular para H_2 como descrito no trabalho “*The Normal State of the Hydrogen Molecule*” através do método de Burrau. Isso proporcionou o valor da energia de ligação e a distância internuclear do H_2 .

Esquema conceitual científico sobre o conteúdo conceitual da UDM (mapa conceitual)



Referências (de acordo com ABNT NBR 6023)

ATKINS, P.; JONES, L. **Princípios de Química**: questionando a vida moderna e o meio ambiente. Porto Alegre: Bookman, 2012. 1055 p.
 BARROS, H. L. C. **Química Inorgânica**: uma introdução: 11ª Ed. Belo Horizonte: Ed UFOP, 2001. 518 p.
 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.

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.

DIAS, B. L. N.; ANJOS, V. C. Espectroscopia de fotoelétrons por Raios X: conceitos físicos e os processos experimentais. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 43, 2021. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2021-0006.

FILGUEIRAS, C. A. Gilbert Lewis e o centenário da Teoria de Ligação por Par de Elétrons. **Química Nova**, v. 39, n. 10, p. 1262-1268, 2016.

HEITLER, W.; LONDON, F. Interaction of Neutral Atoms and Homopolar Binding in Quantum Mechanics. **Zeitschrift für Physik**, Vol. 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.

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

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

MURRELL, J. N. The origins and later developments of molecular orbital theory. **International Journal of Quantum Chemistry**, 2011. DOI 10.1002/qua.23293.

PEIERLS, R. E. Wolfgang Ernst Pauli. 1900-1958. **Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society** 5: 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.

ROSA, P. A. **Louis de Broglie e as ondas de matéria**. 2004. Dissertação (Mestrado em Física) – Unicamp, Campinas, 2004.

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. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 58, p. 645-655, 1996.

ANÁLISE DIDÁTICO-PEDAGÓGICA

Concepções alternativas dos alunos sobre os conteúdos da UDM

Segundo Stefani e Tsarpalis (2009) algumas das dificuldades e concepções equivocadas comuns aos estudantes da Teoria do Orbital Molecular são:

Orbital atômico como camada eletrônica: o orbital atômico é uma camada, na qual, os elétrons estão **inclusos** (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbital atômico é um par de elétrons (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbital atômico como uma região do espaço em que há maior probabilidade de um elétron ser encontrado (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbitais atômicos são representações gráficas de funções de onda (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbital atômico é a probabilidade de encontrar o elétron (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Os orbitais atômicos se assemelham a nuvens de formato específico (Stefani; Tsarpalis, 2009);

As nuvens eletrônicas correspondem a representações exatas de entidades submicroscópicas. Os orbitais do tipo s são circulares porque estão em duas dimensões e os orbitais do tipo p são lobos já que estão em três dimensões (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Os orbitais atômicos são os mesmos para todos os átomos (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Não há diferença entre Ψ e Ψ^2 (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Os orbitais atômicos se relacionam somente à ligação covalente (Stefani; Tsarpalis, 2009);

O hidrogênio possui os orbitais 2s e 2p vazios e as ligações ocorrem com elétrons ocupando esses orbitais (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbitais moleculares são orbitais atômicos (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbitais atômicos são combinados no papel gerando orbitais moleculares (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbitais híbridos são orbitais moleculares (Stefani; Tsarpalis, 2009);

A hibridização é um processo espontâneo (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Orbitais híbridos existem na natureza (Stefani; Tsarpalis, 2009);

A hibridização envolve elétrons de átomos diferentes (Stefani; Tsarpalis, 2009);

Uso do termo “orbital” como substituto para órbitas (Taber, 2004);

Todas as espécies querem ser como os gases nobres (atingir o octeto), afinal isso dá estabilidade (Jenkins; Shoopman, 2019);

Uma menor ordem de ligação indica menor comprimento de ligação (Jenkins; Shoopman, 2019).

**Obstáculos epistemológicos
particulares relacionados aos
conteúdos da UDM**

Obstáculo da experiência primeira

Obstáculo verbal

Obstáculo do conhecimento geral

Obstáculo do conhecimento

unitário e pragmático

Obstáculo substancialista

Obstáculo realista

Obstáculo animista

Os obstáculos epistemológicos propostos por Gaston Bachelard são: a experiência primeira, verbal, conhecimento geral, conhecimento unitário e pragmático, substancialista, realista e animista. O **obstáculo de experiência primeira** é carregado de imagens imediatas e fáceis que, em um primeiro momento, parecem corretas. A barreira oriunda desse obstáculo promove analogias e representações muitas vezes equivocadas. O **obstáculo verbal** é caracterizado pelo uso de imagens, metáforas e analogias que distanciam o indivíduo do conhecimento científico. Nesse sentido, as palavras ganham um grande destaque na oposição à ruptura entre o conhecimento comum e científico. O **obstáculo do conhecimento geral** parte das generalizações que guiam leis gerais sem grandes questionamentos sobre a sua abrangência e variações empíricas. O **obstáculo do conhecimento unitário e pragmático** traz uma supervalorização do fenômeno colocando à parte o pensamento crítico. Além disso, há a necessidade de atribuir alguma utilidade ao fenômeno. O **obstáculo substancialista** atribui propriedades a uma entidade de forma a descrevê-la como um todo, desconsiderando as particularidades e/ou as condições químico-físicas. Já **obstáculo realista** parte de um exagero das observações macroscópicas e concretas em detrimento do comportamento microscópico prejudicando as correlações macro- e microscópicas. O **obstáculo animista** imputa sentimentos, características e qualidades biológicas a objetos inanimados. Por fim, o **obstáculo do conhecimento quantitativo** parte de um exagero no uso de dados quantitativos de forma que não interfiram em um resultado.

Em livros didáticos de Química Geral podem ser encontrados alguns obstáculos epistemológicos como exemplificado abaixo:

“[...] a Teoria dos Orbitais Moleculares, na qual, o foco são os elétrons que se espalham pelo **esqueleto nuclear** e mantêm junta a coleção de átomos que forma a molécula, desenvolveu-se mais do que a Teoria da Ligação de Valência e é o procedimento quase universalmente empregado no cálculo das estruturas moleculares [...]” (ATKINS; JONES, 2012). Nesse trecho há um obstáculo epistemológico do tipo animista em que uma característica biológica é associada com a organização atômica.

“Os orbitais atômicos são **como** ondas centradas em núcleos diferentes (ATKINS; JONES, 2012).” Ao tratar os orbitais atômicos como ondas se faz uma comparação que dificulta o entendimento do significado matemático de orbital como uma função de onda. Assim, nota-se um obstáculo epistemológico do tipo verbal.

“Os orbitais moleculares são formados pela combinação de orbitais atômicos: quando os orbitais atômicos interferem construtivamente, formam-se orbitais ligantes, e quando interferem destrutivamente, formam-se orbitais antiligantes. N orbitais atômicos formam N orbitais moleculares (ATKINS; JONES, 2012).” Para que os orbitais moleculares sejam formados é necessário que os orbitais atômicos possuam energias mais ou menos

próximas e que a sobreposição desses seja efetiva. Portanto, não é qualquer combinação de orbital atômico que irá gerar um orbital molecular, caracterizando tal trecho como sugestivo de um obstáculo epistemológico do tipo conhecimento geral.

“Se mais de um orbital molecular de mesma energia estiver disponível, os elétrons os ocupam um a um, adotando spins paralelos (Regra de Hund) (ATKINS; JONES, 2012).” Essa descrição ocorre, geralmente, ao se preencher um diagrama de orbital molecular. Entretanto, há a possibilidade de um elétron ocupar um orbital já ocupado. Assim, é delicado pensar no preenchimento do diagrama como uma regra em específico. Por isso, entende-se que aqui há um obstáculo do tipo conhecimento geral.

“A configuração do estado fundamental (N_2) é, portanto:

$N_2: \sigma 2s^2 \sigma 2s^{*2} \Pi 2p^4 \sigma 2p^2$.” - (ATKINS; JONES, 2012).

Nessa passagem identifica-se a configuração de parte da molécula N_2 . Sabe-se pela leitura do texto que a camada mais interna (1s) é desconsiderada dos diagramas por uma questão de simplificação. Porém, a constante escrita da camada de valência pode levá-los ao erro de colocar somente essa parte como a configuração molecular. Portanto, entende-se que há um obstáculo do tipo experiência primeira.

Representações gráficas acerca dos orbitais são encontradas como a que segue abaixo (BROWN *et al.*; 2016). A somatória das funções de onda sem o sinal positivo ou negativo produz uma perda de significado físico. Dessa maneira, retrata-se um obstáculo epistemológico verbal.

	The diagram illustrates the formation of molecular orbitals for the H_2 molecule. It shows the combination of two $1s$ atomic orbitals (AOs) into bonding (σ_{1s}) and antibonding (σ_{1s}^*) molecular orbitals (MOs). The bonding MO has a higher electron density between the nuclei, while the antibonding MO has a nodal plane between the nuclei. The diagram also shows the combination of two $2p$ AOs into σ and π bonding and antibonding MOs, distinguishing between frontal and lateral overlap. Energy levels are indicated on the right. Sobreposição frontal $2p_z + 2p_z \rightarrow \sigma_{2p}^* + \sigma_{2p}$ Sobreposição lateral $2p_x + 2p_x \rightarrow \pi_{2p}^* + \pi_{2p}$ $2p_y + 2p_y \rightarrow \pi_{2p}^* + \pi_{2p}$ Combinação destrutiva que leva ao orbital molecular antiligante do H_2. Combinação construtiva que leva ao orbital molecular ligante H_2. Orbitais moleculares H Orbitais moleculares H_2 Plano nodal entre os núcleos Densidade eletrônica concentrada entre os núcleos Energia
Implicações para o ensino dos conteúdos de ensino da UDM Aspectos a evitar e a reforçar	Aspectos a evitar: - Uso dos termos “hibridização” e “orbitais híbridos” como sinônimos de “orbitais moleculares”; - Uso do termo “orbital atômico” como sinônimo de “orbital molecular”; - Associação da ocorrência de ligação química em qualquer orbital vazio; - Associação da representação gráfica de orbitais como um retrato fiel da realidade química; - Uso da hibridização como lei universal no comportamento dos átomos. Aspectos a reforçar: - Distinção entre os termos “orbitais atômicos” e “orbitais moleculares”; - Adoção da hibridização como um modelo para a área da química; - Distinção de hibridização e formação de orbitais híbridos com orbitais moleculares; - Considerações a serem levadas para a formação da ligação química a partir dos orbitais atômicos;

	Distinção do termo “orbitais atômicos” de configurações eletrônicas e pares de elétrons como igualdade; Observação em três dimensões.
Referências (de acordo com ABNT NBR 6023)	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: Contribuição para uma Psicanálise do Conhecimento. 1. Ed. Rio de Janeiro: Contraponto, 1996. 309p. 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. 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. 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.

ABORDAGEM METODOLÓGICA

Princípios teórico-metodológicos da abordagem escolhida
(teoria psicológica, teoria pedagógica, visão de ciência, função do sistema educacional e forma de condução do ensino - funções que professor e aluno desempenham no processo de ensino e aprendizagem)

O Ensino Fundamentado em Modelagem (EFM) se baseia em atividades que utilizem modelos como instrumento de estudo e de desenvolvimento da Ciência. Os modelos compõem teorias científicas e fazem parte do processo de pesquisa, promovendo discussões e reformulações. Mas, o que são modelos? De acordo com Gilbert, Boulter e Elmer (2000), um modelo corresponde a uma representação parcial de uma entidade, elaborado com um, ou mais, objetivo(s) específico(s) e que pode ser modificado. Essa definição foi esmiuçada por Justi (2010) de forma a destacar o significado de um modelo. A representação evidencia o distanciamento de cópias e reproduções, ou seja, um modelo representa um fenômeno e/ou uma teoria da melhor maneira possível para àquela época. Assim, a representação é parcial. Sendo uma representação elaborada pelo homem sabe-se que a mesma possuirá limitações e poderá ser modificada conforme novos conhecimentos e necessidades emergirem e as representações trazidas se mostram inadequadas perante as novas descobertas da realidade. Consequentemente, os modelos podem ser usados para trabalhar o conteúdo científico, gerando conhecimento e sendo um produto da Ciência.

Na área de Ensino de Ciências há 3 objetivos gerais: aprender Ciências, aprender sobre Ciências e aprender a fazer Ciência (Hodson, 2002). A ideia de aprender Ciências remete ao domínio do conhecimento científico. Ao aprender sobre Ciências demanda-se o conhecimento da História, Filosofia e Metodologia da Ciência. Aprender a fazer ciências refere-se a conexão do indivíduo à participação em atividades que promovam conhecimento científico (Hodson, 2002). Esses objetivos gerais alinham-se ao papel dos modelos e da modelagem. De acordo com Justi e Gilbert (2002), os estudantes devem conhecer a natureza, as abrangências e limitações dos modelos para aprender Ciências. Para aprender sobre ciências, é necessário avaliar os modelos que se interligam ao desenvolvimento e ao resultado de uma pesquisa científica. E, para aprender a fazer ciência, representar a realidade e estudá-la, é necessário criar, expressar e testar modelos.

Justi (2010) explica que os objetivos de um modelo se interligam ao público-alvo e a entidade a ser modelada. De forma geral, para a Química, os principais objetivos relacionados a produção de um modelo são:

- a simplificação de entidades complexas;
- a melhora na comunicação de ideias e na visualização de entidades abstratas;
- a fundamentação a proposição e interpretação de experimentos sobre a realidade;
- atuar como mediador entre a realidade modelada e as teorias, fundamentando a elaboração de explicações e previsões (VOSNIADOU, 2002; JUSTI, 2010).

É por meio da modelagem que os alunos participam de atividades de criação, expressão, teste e reformulação de modelos. Para essas atividades, é importante destacar o quão deve ser bem compreendido que os modelos se aplicam para descrição de objetos e fenômenos concretos ou abstratos. Além do mais, todos os pontos discutidos no que tange a representação, a funcionalidade e as modificações devem ser claras. A atividade de modelagem é composta por algumas etapas que não trazem consigo rigidez estrutural, porém, em literatura se sugere que se façam presentes:

- Elaboração do modelo;
- Expressão do modelo;
- Teste do modelo;
- Identificação de abrangências e limitações.

A elaboração do modelo parte da observação de um fenômeno abstrato ou concreto com a possibilidade de uso de dados empíricos. Desse contato, elabora-se um modelo mental que pode partir de modelos pré-existentes ou não. Esse modelo deverá ser expresso de alguma forma, sendo de maneira verbal, gestual, concreta, matemática ou visual. Posteriormente, o modelo deve ser testado. O teste pode ser empírico ou mental de acordo com a disponibilidade de recursos e o próprio objeto de estudo. A identificação de abrangências e limitações envolve a

	socialização de respostas e o reconhecimento de etapas a serem modificadas. A socialização dos modelos promove o diálogo de estudantes com seus pares, o professor e o próprio conhecimento. Enquanto a postura do estudante é incentivada a ser ativa apoiada em relações e reconstruções durante o processo de modelagem, a do docente é orientar as etapas, incentivar e instigar o desenvolvimento do modelo com perguntas de forma que o aluno faça correlações e desenvolva o pensamento científico.
Referências (de acordo com ABNT NBR 6023)	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. GILBERT, J.K., BOULTER, C.J., ELMER, R. Positioning Models in Science Education and in Design and Technology Education. In: GILBERT, J.K., BOULTER, C.J. (Orgs.). Developing Models in Science Education. Springer: Dordrecht. DOI: 10.1007/978-94-010-0876-1_1. 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, 2010. 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. 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.

TÍTULO, OBJETIVOS DE APRENDIZAGEM E SEQUÊNCIAS DIDÁTICAS			
Título da UDM	Teoria do Orbital Molecular: um modelo científico para abordagem de ligações químicas		
Objetivos previstos em Orientações Curriculares Oficiais	Dos conteúdos curriculares básicos em Química almeja-se que o Bacharel atenda, de acordo com o Parecer CNE/CES 1.303/2001, as seguintes temáticas: - Propriedades físico-químicas das substâncias e dos materiais; - Estrutura atômica e molecular; - Análise química (métodos químicos e físicos e controle de qualidade analítico); - Termodinâmica química; - Cinética química; - Estudo de compostos orgânicos; - Organometálicos; - Compostos de coordenação; - Macromoléculas e biomoléculas e - Técnicas de básicas de laboratório.		
Objetivo da UDM	Analisar a Teoria do Orbital Molecular como um modelo científico de ligação química organizando informações para sua elaboração e diferenciação da Teoria de Ligação de Valência.		
Título das SD*	Objetivo das SD	Conteúdo Programático das SD	Tempo Aproximado (em aulas)
1. Modelos de desenvolvimento histórico rumo a TOM e	Entender o que são modelos e a importância desses no meio científico, interpretando atividades de modelagem e exemplificações. Interpretar os aspectos históricos que colaboraram para a elaboração da Teoria do Orbital Molecular, explicando as contribuições e relacionando-as. Lembrar o que são orbitais e as interferências construtivas e destrutivas desses na formulação da ligação química, reconhecendo as relações existentes entre ambos.	- Modelos; - Modelos na Ciência; - Desenvolvimento da TOM.	2 aulas (100 min)

2. A TOM como um modelo para a interpretação da ligação química	Interpretar a ligação química explicando a Teoria do Orbital Molecular com o auxílio da modelagem e dos diagramas para moléculas diatômicas homonucleares. Aplicar as relações de ordem de ligação e preenchimento de orbitais antiligantes, executando um exercício direcionado às espécies de nitrogênio.	- Ligação química; - Diagramas de orbital molecular para moléculas homonucleares; - Ordem de ligação; - Espectroscopia de fotoelétrons; - Orbitais HOMO e LUMO.	2 aulas (100 min)
3. Amplitude do uso da TOM na relação de características junto aos diagramas de orbitais moleculares	Analisar a TOM em exercícios de ligação química organizando os procedimentos necessários na elaboração dos diagramas junto a correlação dos orbitais HOMO/LUMO com a energia de ionização e afinidade eletrônica e a atribuição de orbitais moleculares e características magnéticas.	- Paramagnetismo e diamagnetismo; - Reconhecimento de fenômeno de estado excitado; - Inversão sigma-pi; - Diagramas de orbital molecular para moléculas heteronucleares.	2 aulas (100 min)
Referências (de acordo com ABNT NBR 6023)	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. FERRAZ, A. P. do C. M.; BELHOT, R. V. Taxonomia de Bloom: Revisão Teórica e Apresentação das Adequações do Instrumento para Definição de Objetivos Instrucionais. Gestão & Produção. São Carlos, v. 17, n. 2, p. 421-431, 2010.		

SELEÇÃO DAS ESTRATÉGIAS DIDÁTICAS E DAS ESTRATÉGIAS DE AVALIAÇÃO					
Título da SD1	Modelos e desenvolvimento histórico rumo a TOM				
Objetivo da SD	Entender o que são modelos e a importância desses no meio científico, interpretando atividades de modelagem e exemplificações. Interpretar os aspectos históricos que colaboraram para a elaboração da Teoria do Orbital Molecular, explicando as contribuições e relacionando-as. Lembrar o que são orbitais e as interferências construtivas e destrutivas desses na formulação da ligação química reconhecendo as relações existentes entre ambos.				
Estratégia de Avaliação	Avaliação processual através da entrega dos modelos expressos por grupos e da atividade sobre o desenvolvimento da TOM.				
Dia/Aula*	Estratégia Didática	Conteúdos de ensino	Tempo / Descrição das Atividades / Organização da Sala de Aula	Recursos Didáticos	Materiais de Aprendizagem/ Instrumento de avaliação
Aula 1 (50 min iniciais)	Utilização de modelos.	Modelos; Objetivos da criação de um modelo; Etapas de modelagem; Modelos científicos.	<u>5 min</u> : organização da sala e chamada; <u>10 min</u> : explicação e discussão sobre o que são modelos e quais são os objetivos de sua utilização na Ciência; <u>25 min</u> : atividade de modelagem “Caixa misteriosa” a ser realizada em grupos com 5 integrantes; <u>10 min</u> : discussão e reconhecimento de modelos científicos.	Sala de aula; Uso de computador e projetor; Caixa misteriosa.	Atividade de modelagem em grupo (descrita na seção Apêndice).
Aula 1 (50 minutos restantes)	História e Filosofia da Ciência.	Histórico do desenvolvimento que culmina na Teoria do Orbital Molecular (TOM);	<u>25 min</u> : explicação e discussão de momentos históricos importantes para o desenvolvimento da TOM com uso de atividade guiada pelo professor;	Sala de aula; Uso de computador, projetor e editor de planilhas.	Exercício individual (descrito na seção Apêndice).

		Revisão sobre o significado de orbital, ondas e interferência.	<u>15 min</u> : discussão para revisão do significado de orbital, ondas e interferência.		
Referências (fundamentação das estratégias didáticas e de avaliação escolhidas)	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. 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, 2010. Cap. 8, p. 209-230. MURRELL, J, N. The origins and later developments of molecular orbital theory. International Journal of Quantum Chemistry, 2011. DOI 10.1002/qua.23293.				

SELEÇÃO DAS ESTRATÉGIAS DIDÁTICAS E DAS ESTRATÉGIAS DE AVALIAÇÃO

Título da SD2	A TOM como um modelo para a interpretação da ligação química				
Objetivo da SD	Interpretar a ligação química explicando a Teoria do Orbital Molecular com o auxílio da modelagem e dos diagramas para moléculas diatômicas homonucleares. Aplicar as relações de ordem de ligação e preenchimento de orbitais antiligantes, executando um exercício direcionado às espécies de oxigênio.				
Estratégia de Avaliação	Avaliação processual a partir dos modelos expressos pelos alunos junto ao exercício direcionado.				
Dia/Aula*	Estratégia Didática	Conteúdos de ensino	Tempo / Descrição das Atividades / Organização da Sala de Aula	Recursos Didáticos	Materiais de Aprendizagem/ Instrumento de avaliação
Aula 2 (50 min iniciais)	Uso de modelos; Aula expositiva-dialogada.	Interpretação da ligação química para a Teoria do Orbital Molecular; Ordem de ligação; Elaboração de diagramas de orbital molecular para moléculas diatômicas homonucleares do primeiro e segundo período da tabela periódica.	<u>5 min</u>: organização da sala e chamada; <u>10 min</u>: retomada das ideias principais do dia anterior; <u>15 min</u>: atividade de modelagem sobre a ligação química em moléculas de hidrogênio e hélio; <u>20 min</u>: explicação e construção dos diagramas de orbital molecular para moléculas diatômicas homonucleares do primeiro e segundo período da tabela periódica.	Sala de aula; Uso de computador e projetor; Uso de lousa, canetas e apagador.	Atividade de modelagem em grupo (descrita na seção Apêndice).
Aula 2 (50 min restantes)	Aula expositiva-dialogada.	Diagramas de orbital molecular para moléculas diatômicas homonucleares do primeiro e segundo períodos da tabela periódica.	<u>20 min</u> : continuação da abordagem a diagramas de orbital molecular para moléculas diatômicas homonucleares do primeiro e segundo período da tabela periódica;	Sala de aula; Uso de computador e projetor; Uso de lousa, canetas e apagador.	Exercício individual sobre a estabilidade de espécies de nitrogênio (descrito na seção Apêndice).

		Ordem de ligação e relação com força e comprimento de ligação; Espectroscopia de fotoelétrons; Orbitais moleculares HOMO e LUMO.	<u>10 min</u>: cálculo de ordem de ligação e relação com a força e comprimento da ligação para as moléculas diatômicas; <u>10 min</u>: abordagem da espectroscopia de fotoelétrons como método para validação da TOM e correlação com a primeira energia de ionização; <u>10 min</u>: explicação do que são os orbitais moleculares HOMO e LUMO e suas relações com as propriedades periódicas energia de ionização e afinidade eletrônica.		
Referências (fundamentação das estratégias didáticas e de avaliação escolhidas)	BARROS, H. L. C. Química Inorgânica: uma introdução: 11ª Ed. Belo Horizonte: Ed UFOP, 2001. 518 p. MAHAN, B. M.; MYERS, R. J. Química - um curso universitário. 4ª Ed. São Paulo: Edgard Blucher, 2003. 604 p. MIESSLER, G. L.; FISCHER, P. L.; TARR, D. A. Química Inorgânica. 5ª Ed. São Paulo: Pearson, 2014. 649 p. 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, 2010. Cap. 8, p. 209-230.				

SELEÇÃO DAS ESTRATÉGIAS DIDÁTICAS E DAS ESTRATÉGIAS DE AVALIAÇÃO					
Título da SD3	Amplitude do uso da TOM na relação de características junto aos diagramas de orbitais moleculares				
Objetivo da SD	Analisar a TOM em exercícios de ligação química organizando os procedimentos necessários na elaboração dos diagramas junto a correlação dos orbitais HOMO/LUMO com a energia de ionização e afinidade eletrônica e a atribuição de orbitais moleculares e características magnéticas.				
Estratégia de Avaliação	Avaliação processual a partir dos modelos expressos pelos alunos junto a discussão das atividades.				
Dia/Aula*	Estratégia Didática	Conteúdos de ensino	Tempo / Descrição das Atividades / Organização da Sala de Aula	Recursos Didáticos	Materiais de Aprendizagem/ Instrumento de avaliação
Aula 3 (50 min iniciais)	Uso de modelos; Aula expositiva-dialogada	Paramagnetismo e diamagnetismo das moléculas de oxigênio; Inversão sigma-pi; Aparecimento de cor como fenômeno de estado excitado.	<u>5 min</u> : organização da sala e chamada; <u>5 min</u> : retomada da ideia de construção de diagramas de orbital molecular; <u>15 min</u> : atividade de modelagem sobre o paramagnetismo do oxigênio; <u>10 min</u> : explicação dos motivos de haver a inversão sigma-pi na transição de diagramas do N ₂ para o O ₂ ; <u>5 min</u> : reconhecimento de fenômenos excitados em diagramas; <u>10 min</u> : diagramas de orbital molecular para moléculas heteronucleares.	Sala de aula; Uso de computador e projetor; Uso de internet; Uso de lousa, canetas e apagador.	Atividade de modelagem (descrita na seção Apêndice) em grupos com 5 estudantes.
Aula 3 (50 min restantes)	Método de trabalho de grupo.	Diagramas de moléculas diatômicas heteronucleares;	<u>15 min</u> : execução da atividade em grupo; <u>35 min</u> : discussão da atividade.	Sala de aula; Uso de computador e projetor;	Atividade em grupo (descrita na seção Apêndice).

				Uso de lousa, canetas e apagador.	
Referências (fundamentação das estratégias didáticas e de avaliação escolhidas)	ATKINS, P.; JONES, L. Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente. Porto Alegre: Bookman, 2012. 1055 p. 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, 2010. Cap. 8, p. 209-230. LEE, J. D. Química inorgânica não tão concisa. 5ª ed. São Paulo: Edgard Blücher, 1999. 527 p. LIBÂNEO, J. C. Didática. São Paulo: Cortez, 1990. 288 p.				

ATIVIDADES

ATIVIDADE 1

Divididos em grupos, os estudantes deverão propor modelos para o conteúdo da caixa misteriosa a partir de etapas a serem realizadas na sequência:

- a) Não se pode chacoalhar a caixa → primeiro modelo.
- b) Chacoalhem a caixa → segundo modelo.
- c) Uso de um ímã → terceiro modelo.

ATIVIDADE 2

1) Construa uma linha do tempo que apresente, resumidamente, as principais características que levaram a origem da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Destaque as palavras principais dessas características mencionadas por você. Não se esqueça de elencar datas e nomes dos cientistas envolvidos em sua linha do tempo. Em seguida, selecione ao menos 3 acontecimentos e explique a importância desses para a TOM relacionando-os em uma pequena descrição de no máximo 15 linhas.

2) O estudo das ligações químicas envolve os orbitais, as interferências construtivas e destrutivas das funções de onda e a noção probabilística de um elétron. Descreva como esses assuntos se relacionam e colaboram na interpretação do que vem a ser a ligação química.

Instruções:

- Exercício individual.
- Entrega na próxima aula em folha.

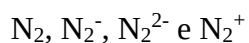
ATIVIDADE 3

Elabore um modelo que explique a existência ou não existência da molécula de hidrogênio com base nas teorias de ligação química (Passo 1).

Faça o mesmo para explicar a existência ou não existência da molécula de hélio (Passo 2).

ATIVIDADE 4

Classifique a estabilidade das espécies abaixo em ordem crescente e justifique a sua escolha com base na Teoria do Orbital Molecular.



Instruções:

- Exercício individual.
- Entrega em aula.

ATIVIDADE 5

Na escola, Marie teve à sua disposição os seguintes materiais:

- Prato;
- Água;
- Detergente;
- Canudo;
- Ímã.

Marie colocou um pouco de água e detergente no prato. Em seguida, usou o canudo para formar uma bolha de ar na água com detergente e aproximou um ímã.



Fonte: Elaboração própria.

De posse dessas informações e do conhecimento químico acerca das teorias de ligação química, proponha um modelo que prediga se houve ou não interação entre a bolha de ar e o ímã.

Posteriormente, Marie fez outra bolha, mas, dessa vez, utilizou o cilindro de gás oxigênio e, novamente, aproximou um ímã. Houve interação entre a bolha e o ímã. (Passo 2 com exibição de vídeo sobre o paramagnetismo do gás oxigênio).



Fonte: Elaboração própria.

ATIVIDADE 6

Em grupos e através de um sorteio, os estudantes receberão uma questão a ser discutida. A atividade é mediada pelo professor que pode auxiliar os alunos. Cada resolução será socializada com a sala a fim de ser discutida.

Questão 1.

Acerca dos elementos que compõem a TOM:

- a) Diferencie os orbitais híbridos dos orbitais moleculares;
- b) Conclua como os orbitais atômicos se relacionam com os orbitais moleculares promovendo a ligação química e compare o uso desses na TOM com o uso na TLV;
- c) Organize a inversão sigma-pi de acordo com a carga nuclear efetiva.

Questão 2.

Esboce o diagrama de orbitais moleculares para o óxido nítrico.

Compare esse modelo elaborado através da TOM com o modelo fornecido pela TLV para essa molécula apontando conclusões.

Dados:

N ($Z = 7$)

O ($Z = 8$)

Questão 3.

Esboce o diagrama de orbitais moleculares para o fluoreto de hidrogênio. Identifique todos os orbitais atômicos e moleculares. Represente por meio de um desenho

a combinação dos orbitais atômicos envolvidos com a ligação química estabelecida entre o hidrogênio e o flúor.

Dados:

H ($Z = 1$)

F ($Z = 9$)

Questão 4.

A partir dos diagramas de orbital molecular, diferencie porque o íon O_2^+ tem maior força de ligação que o O_2 . Em seguida, explique o motivo do íon N_2^+ ter menor força de ligação comparado ao N_2 .

Questão 5.

Através do diagrama de orbitais moleculares para o gás cloro atribua uma provável transição eletrônica que possa justificar o aparecimento da cor amarelo-esverdeada e diferencie essa perspectiva fornecida pela TOM com as possibilidades da TLV.

Questão 6.

Sabendo que as energias de afinidade eletrônica dos halogênios F, Cl, Br e I são próximas, represente por meio de um gráfico como devem se comportar as energias de ionização desses átomos. Nesse gráfico atribua a relação dessas propriedades periódicas com os orbitais HOMO e LUMO e conclua como isso ajuda a explicar a eletronegatividade desses átomos.

Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

Você está sendo convidado para participar da pesquisa “O ensino da Teoria do Orbital Molecular em moléculas diatômicas: uma proposta para o ensino superior”, sob responsabilidade de Joana Souza Oliveira Galavotti (aluna de pós-graduação do curso doutorado em Química) e Marco Aurélio Cebim (orientador e professor da disciplina). Esta pesquisa foi avaliada pelo Comitê de Ética em Pesquisa com Seres Humanos da Faculdade de Ciências e Letras de Araraquara FCLAR - UNESP, que tem como função defender os interesses dos participantes das pesquisas, em sua integridade e dignidade, contribuindo para o desenvolvimento da ciência dentro dos padrões éticos. O estudo tem como objetivo analisar as contribuições de uma Unidade Didática Multiestratégica baseada no Ensino Fundamentado em Modelagem para abordagem da Teoria do Orbital Molecular voltada aos estudantes do Bacharelado em Química do Instituto de Química e será realizado por meio de uma intervenção educativa acerca da Teoria do Orbital Molecular a ser feita em sala de aula. Atividades em grupo serão propostas, às quais, as respostas deverão ser entregues em papel fornecido pelo pesquisador. As atividades serão feitas em sala durante o período de aula. As atividades não possuirão nota e não serão identificadas com o nome pessoal de cada estudante, mas a frequência será contabilizada. A coleta de dados será feita a partir das respostas fornecidas por escrito às atividades. A interpretação dos dados se dará por meio da análise de conteúdo de Laurence Bardin, uma metodologia usada para descrever e interpretar o conteúdo de textos e documentos. Você tem o direito de solicitar esclarecimentos sobre os procedimentos, antes e durante a realização da pesquisa. Afirmamos nosso compromisso em não promover a identificação dos sujeitos e quaisquer despesas financeiras ou materiais dos envolvidos, bem como os riscos de dano físico, moral ou ético. Ainda assim, é possível que haja ao longo das aulas um mínimo desconforto por timidez e/ou medo de dialogar com o professor e os colegas acerca dos conhecimentos químicos já trabalhados no decorrer do curso ou em andamento.

Todas as respostas serão devidamente armazenadas a fim de manter a privacidade, o sigilo, a confidencialidade e o anonimato do participante. Tais documentos serão armazenados em local arejado e limpo, livre de poeira, calor, umidade e alimento, sob proteção da exposição solar e de produtos químicos. Serão utilizadas pastas de plástico com tamanho maior que o documento para não o amassar. As folhas não serão dobradas para que não se tornem mais frágeis e procurar-se a evitar o uso de grampeadores e cliques

de metal que podem enferrujar. Somente os pesquisadores do projeto, que se comprometeram com o dever de privacidade, sigilo, confidencialidade e anonimato terão acesso aos seus dados e não farão uso destas informações para outras finalidades, sendo que qualquer dado que possa vir a identificá-lo será omitido na divulgação dos resultados. A qualquer momento você pode desistir de participar e retirar seu consentimento. Sua recusa não trará nenhum prejuízo em sua relação com o pesquisador ou com a instituição. Espera-se que o projeto contribua de modo que a intervenção educativa possibilite um amplo entendimento sobre a Teoria do Orbital Molecular a partir de uma sequência de aulas planejadas e organizadas a partir de uma Unidade Didática Multiestratégica, destacando ao longo das aulas as interpretações sobre ligação química, fenômenos de estado excitado, diamagnetismo e paramagnetismo, ordem de ligação e estabilidade. A proposta de abordagem da Teoria da Orbital Molecular e os dados resultantes da aplicação serão apresentados em tese, colaborando com a área de Ensino em Química na proposição de um material e nas discussões que venham a surgir.

Você receberá uma via deste termo no qual constam o telefone e o endereço do pesquisador principal, podendo tirar suas dúvidas sobre o projeto e sua participação, agora ou a qualquer momento.

Dessa forma, você foi esclarecido sobre os objetivos da pesquisa, os procedimentos que serão utilizados e riscos. As informações obtidas através dessa pesquisa serão confidenciais e asseguramos o sigilo sobre sua participação. Você está ciente do direito assegurado de não participar, ou de interromper a participação no momento que achar necessário, além da garantia de indenização por eventuais danos decorrentes da participação nessa pesquisa, nos termos da legislação civil (Código Civil Lei 10.406 de 10/01/2002).

Declaro que entendi os objetivos, riscos e benefícios de minha participação na pesquisa e concordo em participar.

Local e data _____, _____ de _____ de 20__

Nome do participante: _____

Assinatura do participante da pesquisa

_____*(assinatura)*

Pesquisador

Joana Souza Oliveira Galavotti

Endereço: Avenida Professor Francisco Degni, n. 55 – Jardim Quitandinha

E-mail: joanagalavotti@unesp.br

_____*(assinatura)*

Orientador

Marco Aurélio Cebim

Endereço: Avenida Professor Francisco Degni, n. 55 – Jardim Quitandinha

E-mail: marco.cebim@unesp.br.