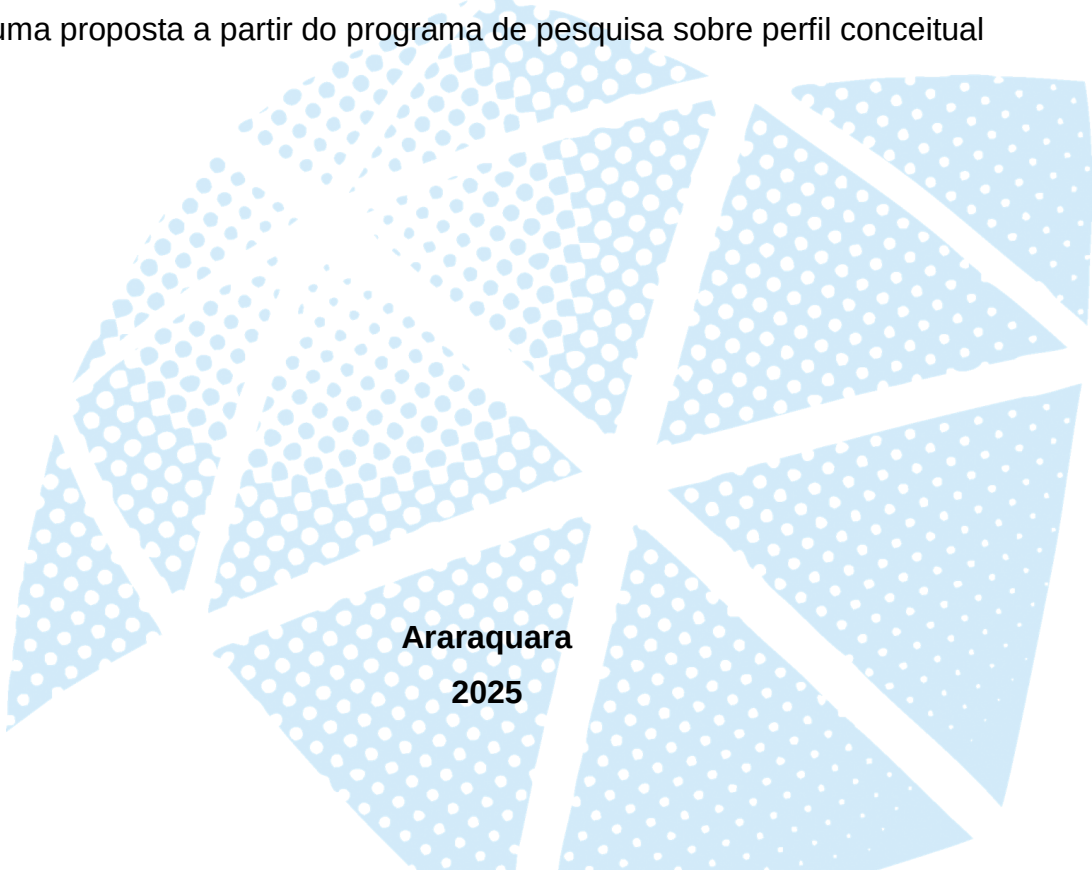


UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA – UNESP
Instituto de Química - Câmpus de Araraquara

RAUL DA COSTA CASAUT

**O ENSINO DA LIGAÇÃO COVALENTE NO ENSINO SUPERIOR NA
PERSPECTIVA DA APRENDIZAGEM:**

uma proposta a partir do programa de pesquisa sobre perfil conceitual



Araraquara
2025

RAUL DA COSTA CASAUT

**O ENSINO DA LIGAÇÃO COVALENTE NO ENSINO SUPERIOR NA
PERSPECTIVA DA APRENDIZAGEM:**

uma proposta a partir do programa de pesquisa sobre perfil conceitual

Tese apresentada à Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara, para obtenção do título de Doutor em Química.

Área de Concentração: Ensino de Química

Orientador: Prof. Dr. Amadeu Moura Bego

Araraquara

2025

C336e	Casaut, Raul da Costa O ensino da ligação covalente no ensino superior na perspectiva da aprendizagem : uma proposta a partir do programa de pesquisa sobre perfil conceitual / Raul da Costa Casaut. -- Araraquara, 2025 157 f. Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara Orientador: Amadeu Moura Bego 1. Ligações químicas. 2. Ciência - Estudo e Ensino. 3. Professores - Formação. 4. Inovações educacionais - Brasil. 5. Conceitos. I. Título.
-------	--

IMPACTO POTENCIAL DESTA PESQUISA

A presente tese apresenta uma ferramenta para o planejamento, desenvolvimento e análise crítica de processos de ensino-aprendizagem técnicos e inovadores, centrados na promoção de uma educação de qualidade, mais plural e multifacetada, que promova redução de desigualdades na realidade local de seus agentes, com potencial de internacionalização.

POTENTIAL IMPACT OF THIS RESEARCH

This thesis presents a tool for the planning, development and critical analysis of technical and innovative teaching-learning processes, focused on promoting quality education, more plural and multifaceted, which promotes the reduction of inequalities in the local reality of its agents, with potential for internationalization.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: "O ensino de ligação covalente no Ensino Superior na perspectiva da aprendizagem: uma proposta a partir do programa de pesquisa sobre perfil conceitual"

AUTOR: RAUL DA COSTA CASAUT

ORIENTADOR: AMADEU MOURA BEGO

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

Prof. Dr. AMADEU MOURA BEGO (Participação Virtual)

Departamento de Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Documento assinado digitalmente
 **AMADEU MOURA BEGO**
Data: 20/05/2025 19:26:06-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof.^a Dr.^a EDENIA MARIA RIBEIRO DO AMARAL (Participação Virtual)

Departamento de Química / Universidade Federal Rural de Pernambuco - UFRPE - Recife

Documento assinado digitalmente
 **EDENIA MARIA RIBEIRO DO AMARAL**
Data: 21/05/2025 07:08:00-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. MARCO AURELIO CEBIM (Participação Virtual)

Departamento de Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Documento assinado digitalmente
 **MARCO AURELIO CEBIM**
Data: 23/05/2025 07:37:03-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. JOSÉ EUZÉBIO SIMÕES NETO (Participação Virtual)

Departamento de Química / Universidade Federal Rural de Pernambuco - UFRPE – Recife

Documento assinado digitalmente
 **JOSÉ EUZÉBIO SIMÕES NETO**
Data: 23/05/2025 12:26:26-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof.^a Dr.^a MARIAN ROSALY DAVOLOS (Participação Virtual)

Departamento de Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP – Araraquara

Araraquara, 20 de maio de 2025

DADOS CURRICULARES

IDENTIFICAÇÃO	
Nome	Raul da Costa Casaut
Data de nascimento	18/02/1993
Nacionalidade	brasileira
Nome em citações bibliográficas:	Casaut, Raul da Costa Casaut, R. C.
Currículo Lattes	http://lattes.cnpq.br/2566739839208633
ORCID	https://orcid.org/0000-0002-5376-2928
FORMAÇÃO ACADÊMICA	
08/07/2016	Bacharel em Química. Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, UNESP, Brasil.
17/04/2023	Licenciado em Química. Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, UNESP, Brasil.
20/05/2019	Mestrado em Química. Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, UNESP, Brasil.
PRODUÇÃO BIBLIOGRÁFICA	
CASAUT, R. C. Ações Afirmativas De Acesso Ao Ensino Superior: análise das características estruturais e organizacionais dos cursinhos populares da Unesp. <i>In</i>: ENCONTRO ÍBERO-AMERICANO DE EDUCAÇÃO, 14., 2019, Araraquara. Anais [...]. Bauru: Editora Ibero-Americana de Educação, 2020. p 371. CASAUT, R. C.; BEGO, A. M. Cursinhos Populares da Unesp: objetivos pedagógicos e público-alvo. <i>In</i>: EVENTO DE EDUCAÇÃO EM QUÍMICA, 17., 2019, Araraquara. Anais do XVII EVEQ, 2019. CASAUT, R. C.; BEGO, A. M. Histórico, Conquistas e Desafios dos Cursinhos Populares: Em Foco os Cursinhos Populares da Unesp. 1. ed. Curitiba: Editora	

Appris, 2020. v. 1. 221p.

CASAUT, R. C. BEGO, A. M. Práticas hegemônicas nos cursinhos populares universitários e os objetivos institucionalizados: aproximações e afastamentos para o caso da Unesp. **Revista Temas em Educação**. João Pessoa, Brasil, v. 30, n. 1, p. 273-290, jan./abr., 2021.

PARTICIPAÇÃO EM BANCAS E ORIENTAÇÕES

Bancas de trabalhos de conclusão

BEGO, A. M.; FERRARI, T. B.; CASAUT, R. C. **Desenvolvimento de uma Unidade Didática Multiestratégica para o ensino de isomeria no contexto dos cursinhos populares**. 2021. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Química) - Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Araraquara, 2021.

PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS

ENCONTRO ÍBERO-AMERICANO DE EDUCAÇÃO, 14., 2019 (Araraquara). Ações Afirmativas De Acesso Ao Ensino Superior: análise das características estruturais e organizacionais dos cursinhos populares da Unesp. 2019. (Comunicação Oral).

EVENTO DE EDUCAÇÃO EM QUÍMICA, 17., 2019, (Araraquara). Cursinhos Populares da Unesp: objetivos pedagógicos e público-alvo. 2019. (Comunicação Oral).

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, que são toda a base em toda vertente da minha vida. Sem ser piegas, mas nesse período tão delicado e que marcou o verdadeiro amadurecimento em minha vida, foi que percebi a sorte de poder contar (e saber que posso contar) com vocês.

Agradeço a minha irmã, que do outro lado do oceano sempre me traz um ponto de paz, uma perspectiva da vida como não consigo ver com as minhas lentes.

Aos meus avós, Maria (do Chico) e Chico, pelo amor incondicional, inspiração diária e a vontade de viver e conquista. Em especial, uma dedicação *in memoriam* a minha avó Maria (do Totonho), que tanto cuidou de mim e me ensinou, em vida e após ela, mesmo quando já não parecia mais ter as forças para isso.

Um agradecimento muito especial a todos os membros da Rede de Inovação e Pesquisa em Ensino de Química – RIPEQ, por todo apoio acadêmico, científico e parceria em momentos tão distintos dessa etapa. E, claro, agradeço por toda orientação (mas muito mais do que isso) que o professor Amadeu Moura Bego proporcionou. De uma grande parte da minha vida adulta e de quem eu sou, devo muito a ele.

Aos meus amigos, que da escola, festas e bebedeiras, se tornaram aqueles que amadureceram comigo e que levarei para vida, casamentos e batizados. Um grande abraço aos jacarés eternos Coitado, Celino, Pic, Finazi, Juan, Fruta, Linguixa e Termo. Ao meu amigo mais improvável e housemate, Marisa, e aquele que preciso ver poucas vezes ao ano, desde que a troca de memes seja constante, Dexter.

Agradeço também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pela bolsa concedida no período, processo 141091/2020-7, que possibilitou o pleno desenvolvimento e aprofundamento das etapas dessa pesquisa.

RESUMO

A ligação covalente é um conceito central na Química e também polissêmico, com significados advindos de diferentes teorias desenvolvidas ao longo da história das Ciências. No contexto de ensino-aprendizagem, a forma como essas teorias são tradicionalmente abordadas pode se constituir de uma fonte de obstáculos, sobretudo de natureza epistemológica e ontológica, a compreensão das especificidades relacionadas a elas. Como forma de modelar as diferentes formas do pensamento verbal acerca do conceito, foi proposto por Baltieri um Perfil Conceitual para a Ligação Covalente, a partir das diferentes formas de se conceber o conceito, estabilizadas por compromissos epistemológicos e ontológicos investigados em três domínios genéticos distintos. Como o próprio Baltieri aponta, a exploração do domínio microgenético foi limitada a um questionário aplicado a poucos estudantes, podendo comprometer o estabelecimento de fortes relações com os dados obtidos nos demais domínios. Com isso, a presente pesquisa foi desenvolvida a partir de dois objetivos principais: uma revisão do perfil proposto, a partir de uma investigação mais aprofundada do domínio microgenético, e análise das diferentes formas de conceber a ligação covalente em livros didáticos de Química Inorgânica no Ensino Superior, a partir do perfil conceitual da ligação covalente. Para a revisão do perfil, em um primeiro momento foi aplicado o questionário a um número consideravelmente maior de estudantes de Química do Ensino Superior, e em diferentes cursos, visando maior pluralidade de participantes. Da análise das respostas, identificou-se os compromissos epistemológicos e ontológicos que os estudantes concebem ao falar acerca da ligação covalente, e traçou-se relações com aqueles identificados nos demais domínios genéticos. Com isso, estabeleceu-se um Perfil Conceitual mais robusto e com zonas estabilizadas a partir dos diferentes domínios. Na segunda etapa da pesquisa, investigou-se como diferentes livros didáticos utilizados em cursos de Química no Ensino Superior concebem a ligação covalente em contextos de explicação e aplicação desse conceito. O Perfil Conceitual foi utilizado nessa etapa para identificar como as diferentes concepções são abordadas no livro e possíveis impactos para processos de ensino-aprendizagem relacionados com o conceito. Os livros mostraram considerar os diferentes significados e muitas de suas especificidades para aplicar em contextos, porém também foram identificados trechos com obstáculos epistemológicos e ontológicos. Da análise dos resultados, foi possível apontar potencialidades do uso do Perfil Conceitual da Ligação covalente na investigação e proposição de processos de ensino-aprendizagem mais plurais e abrangentes, que levem em conta a polissemia em torno do conceito.

Palavras-chave: Ligações químicas; Ciência – Estudo e Ensino; Professores – Formação; Inovações educacionais – Brasil; Conceitos.

ABSTRACT

The covalent bond is a central concept in chemistry and is also polysemous, with complementary meanings from different theories developed throughout the history of science. In the teaching-learning context, the way these theories are traditionally approached can constitute a source of obstacles, especially of an epistemological and ontological nature, to understanding the specificities related to them. As a way of modeling the different forms of verbal thinking about the concept, Baltieri (2020) proposed a Conceptual Profile for the Covalent Bond. To identify the main epistemological and ontological commitments that stabilize these different ways of conceiving the concept, three genetic domains were investigated: ontogenetic, sociocultural and microgenetic. The relationships identified and revealed in these domains, elaborated as specific areas of the profile. However, as the author himself points out, the exploration of the microgenetic domain was limited to a questionnaire administered to some students, which could compromise the establishment of strong relationships with data obtained in other domains. Therefore, the present research was developed responding to two main objectives: a review of the proposed profile, based on a more in-depth investigation in the microgenetic domain, and an exploration of the potential of this profile within the teaching-learning context. To review the profile, the questionnaire was initially applied to a much larger number of higher education chemistry students, and in different courses, investigating a greater plurality of contexts. From the analysis of the responses, the epistemological and ontological commitments that students conceive when talking about the covalent bond are agreed, and draw relationships with those identified in other genetic domains. With this, a more robust Conceptual profile was distributed with stabilized areas from different domains. In the second stage of the research, we investigated how different textbooks used in Chemistry courses in higher education conceive the covalent bond in contexts of explanation and application of this concept. The Conceptual Profile was used at this stage to identify how different concepts are addressed in the book and possible impacts on teaching-learning processes related to the concept. The books showed that they consider different meanings and many of their specificities to be applied in contexts, but sections with epistemological and ontological obstacles were also identified. From the analysis of the results, it was possible to point out the potential for using the Covalent Bond Conceptual Profile in investigating and proposing more plural and comprehensive teaching-learning processes, which take into account the polysemy surrounding the concept.

Keywords: Chemical Bonds; Chemistry Teachers; Misconception; Semantic Matrix; Education Study and teaching (Graduate).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Perfil Epistemológico da noção pessoal de Bachelard sobre o conceito de massa.....	21
Figura 2 - Frequência (%) das categorias da Matriz Semântica do conceito de Adaptação codificadas nas unidades de registro.	42
Figura 3 - Exemplos de aplicação do conceito de Ligação Covalente na linguagem cotidiana.....	45
Figura 4 – Estruturas atômicas dos átomos Li, Be, B, C, N, O e F, pelo modelo do átomo cúbico de Lewis.....	56
Figura 5 – Diferentes representações propostas por Lewis da estrutura da molécula de iodo.	57
Figura 6 – Resposta do estudante M01 para a Q03.....	80
Figura 7 - Geometria tetraédrica prevista para os íons moleculares SO_3^{2-} e PCl_4^+ , por VSEPR.....	97
Figura 8 – Diagrama de níveis de energia do orbital molecular para a molécula de fluoreto de hidrogênio (HF).....	110
Figura 9 – Estruturas de ressonância canônicas para a molécula de S_4N_4	117
Figura 10 – Estruturas de ressonância para a molécula de trióxido de enxofre (SO_3).	118
Figura 11 - Representação da molécula de tetracloreto de carbono (CCl_4) a partir da concepção de LC como par de elétrons compartilhado.	127
Figura 12 – Exemplo de hibridização para a molécula de CH_4	129
Figura 13 - Distribuição eletrônica nos estados fundamental e excitado do átomo de boro, em boratos.	130
Figura 14 – Distribuição eletrônica para o átomo de fósforo nos estados fundamental e excitado, a partir dos fundamentos da TLV.....	133
Figura 15 - Configuração eletrônica, orbitais atômicos e moleculares para a molécula de NO.....	136

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Livros didáticos analisados, pela análise das bibliografias recomendadas nas disciplinas escolhidas.	75
Tabela 2 - Frequência das zonas do PC de LC na obra "Shriver & Atkins Inorganic Chemistry".	95
Tabela 3 - Usos e contextos de aplicação da segunda zona do PC da LC, na obra "Shriver & Atkins Inorganic Chemistry".....	95
Tabela 4 - Usos e contextos de aplicação da terceira zona do PC da LC, na obra "Shriver & Atkins Inorganic Chemistry".....	101
Tabela 5 - Usos e contextos de aplicação da quarta zona do PC da LC, na obra "Shriver & Atkins Inorganic Chemistry".....	105
Tabela 6 - Frequência das zonas do PC de LC na obra "Advanced Inorganic Chemistry".	113
Tabela 7 - Usos e contextos de aplicação da segunda zona do PC da LC, na obra "Advanced Inorganic Chemistry".	114
Tabela 8 - Usos e contextos de aplicação da terceira zona do PC da LC, na obra "Advanced Inorganic Chemistry".	116
Tabela 9 - Usos e contextos de aplicação da quarta zona do PC da LC, na obra "Advanced Inorganic Chemistry".	120
Tabela 10 - Frequência das zonas do PC de LC na obra "Concise Inorganic Chemistry".	124
Tabela 11 - Usos e contextos de aplicação da segunda zona do PC da LC, na obra "Concise Inorganic Chemistry".	125
Tabela 12 - Usos e contextos de aplicação da terceira zona do PC da LC, na obra "Concise Inorganic Chemistry".	128
Tabela 13 - Usos e contextos de aplicação da quarta zona do PC da LC, na obra "Concise Inorganic Chemistry".	133

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Caracterização enunciativa das zonas de um PC de Adaptação.	43
Quadro 2 -Temas epistemológicos identificados para a Ligação Covalente	47
Quadro 3 - Matriz semântica de significação do conceito de ligação covalente.	49
Quadro 4 - Caracterização da primeira zona, Conectividade Indiscriminada.	51
Quadro 5 - Caracterização da segunda zona, Atratividade Estabilizadora.....	52
Quadro 6 - Caracterização da terceira zona, Remanescência Localizada.	52
Quadro 7 - Caracterização da quarta zona, Deslocalização Sistemática.	53
Quadro 8 - Significados da LC e caracterizações enunciativas identificadas nas respostas ao Questionário.	78
Quadro 9 - Usos e ocorrências do quarto significado nas respostas ao Questionário.	84
Quadro 10 – Usos e ocorrências do quinto significado nas respostas ao Questionário.	88
Quadro 11 - Usos e ocorrências do sexto significado nas respostas ao Questionário.	90

LISTA DE SIGLAS

CA: Concepções Alternativas

BDE: Bond Dissociation Energy

CLAO: Combinação Linear de Orbitais Atômicos

DFT: Density Functional Theory

HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital

LC: Ligação Covalente

LD: Livros Didáticos

LUMO: Lowest Occupied Molecular Orbital

PC: Perfil Conceitual

PE: Perfil Epistemológico

TLV: Teoria da Ligação de Valência

TOM: Teoria do Orbital Molecular

UNESP: Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”

URT: Unidade de Registro Textual

VSPER: Valence Shell Eletronic Pair Repulsion.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	16
1 A TEORIA DO PERFIL CONCEITUAL: VISITANDO ALGUMAS BASES TEÓRICAS E METODOLÓGICAS	20
1.1 Origens da teoria do Perfil Conceitual	20
1.2 O processo de formação de conceitos em uma perspectiva sociocultural	22
1.3 Conceituação e a visão sociointeracionista de domínio de conceito	25
1.4 Domínios genéticos de Vygotsky e produção de significado em diferentes contextos	29
1.5 Bases metodológicas na construção de um Perfil Conceitual	33
1.6 Aplicações do Perfil Conceitual como ferramenta de análise	35
1.7 Considerações do capítulo	44
2 O PERFIL CONCEITUAL DA LIGAÇÃO COVALENTE	45
3 CONCEPÇÕES E CARACTERÍSTICAS DA LIGAÇÃO QUÍMICA E COVALENTE NOS MODELOS CLÁSSICO E QUÂNTICO	55
3.1 O Modelo Clássico da Ligação Covalente: ideias acerca do compartilhamento de elétrons	56
3.2 O Modelo Quântico da Ligação Química	59
3.2.1 Contribuições da TLV para a investigação da natureza da ligação química	59
3.2.2 A Ligação Química e Covalente na Teoria do Orbital Molecular	63
4 PERCURSO METODOLÓGICO	66
4.1 Problema e Questões de Pesquisa	66
4.2 Refinamento do domínio microgenético	67
4.3 Análise de livros didáticos a partir do Perfil Conceitual da Ligação Covalente	73
4.4 Considerações do Percurso Metodológico	77
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	78
5.1 Análise das respostas ao Questionário para exploração do domínio microgenético e revisão do Perfil Conceitual da Ligação Covalente	78

5.1.1 Características e emergências do Primeiro Significado nas respostas ao Questionário	79
5.1.2 Características e emergências do Segundo Significado nas respostas ao Questionário	81
5.1.3 Características e emergências do Terceiro Significado nas respostas ao Questionário	82
5.1.4 Características e emergências do Quarto Significado nas respostas ao Questionário	84
5.1.5 Características e emergências do Quinto Significado nas respostas ao Questionário	87
5.1.6 Características e emergências do Sexto Significado nas respostas ao Questionário	90
5.1.7 Considerações gerais da análise das respostas ao Questionário	93
5.2 Análise dos livros didáticos usados em cursos de Química no Ensino Superior .	94
5.2.1 Resultados e discussão da obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”	94
5.2.1.1 A segunda zona do PC da LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”	95
5.2.1.2 A terceira zona do PC da LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”	101
5.2.1.3 A quarta zona do PC da LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”	105
5.2.1.4 Considerações gerais acerca do uso de diferentes concepções para a LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”	111
5.2.2 Resultados e discussão da obra “Advanced Inorganic Chemistry”	112
5.2.2.1 A primeira zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”	113
5.2.2.2 A segunda zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”	114
5.2.2.3 A terceira zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”	116

5.2.2.4 A quarta zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”	120
5.2.2.4 Considerações gerais acerca do uso de diferentes concepções para a LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”	123
5.2.3 <i>Resultados e discussão da obra “Concise Inorganic Chemistry”</i>	124
5.2.3.1 A segunda zona do PC da LC na obra “Concise Inorganic Chemistry”	125
5.2.3.2 A terceira zona do PC da LC na obra “Concise Inorganic Chemistry”	128
5.2.3.3 A quarta zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”	133
5.2.4 <i>Considerações gerais acerca da análise dos LD, no contexto de ensino- aprendizagem</i>	137
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	140
REFRERÊNCIAS:	144
ANEXO – QUESTIONÁRIO	150
APÊNDICE A – CURSOS DE QUÍMICA NAS INSTITUIÇÕES DE ENSINO SUPERIOR DE SÃO PAULO, DISCIPLINAS ESCOLHIDAS E FORMA DE ACESSO DOS PLANOS DE ENSINO.	152
APÊNDICE B: TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO	156

INTRODUÇÃO

O Perfil Conceitual (PC) se constitui como modelo da heterogeneidade do pensamento verbal acerca de um conceito científico. Desenvolvido inicialmente por Mortimer (1995) como um contraponto a noção da mudança conceitual (Posner *et. al.*, 1982), a teoria do PC reconhece que diferentes maneiras de se conceber o conceito podem coexistir em um mesmo conceito, e o perfil seria uma ferramenta que retrata essas diferentes possibilidades de concepções. A aprendizagem de Ciências, assim, é pautada na *evolução conceitual* de um sujeito, ao tomar contato com as diferentes formas de se conceber um conceito e potencializar sua capacidade de aplicar essas formas em contextos adequados (Mortimer *et. al.*, 2014a).

Os diferentes modos associados com a enunciação, por um sujeito, acerca de um conceito são apresentados em **zonas** em um PC. Inspirado na construção do Perfil Epistemológico (PE) de Bachelard (1979), as zonas de um PC são estabilizadas por compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos, e geralmente apresentadas em um crescente de complexidade acerca do conceito científico (Mortimer *et. al.*, 2014a; Vairo; Rezende Filho, 2013). Para um sujeito, o seu PC é único, com o peso atrelado a diferentes zonas sendo resultante de sua própria trajetória pessoal de relações e aplicações do conceito. No entanto, a relação entre as maneiras de pensar e os compromissos coletivamente construídos que as estabilizam caracteriza a natureza **supraindividual** de um PC: os diferentes significados atrelados a um conceito são concebidos de forma similar para diferentes sujeitos, o que possibilita a efetiva comunicação entre sujeitos (El-Hani; Silva Filho; Mortimer, 2014).

De forma a possibilitar a construção de zonas que sejam representativas das diferentes maneiras de se conceber um conceito, temos que a etapa da investigação e articulação entre os compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos se configura como de essencial importância na elaboração de um novo PC. Embora não haja regras específicas para esse fim, diferentes pesquisas contribuíram para o estabelecimento de procedimentos metodológicos característicos dentro do Programa de Pesquisa em PC (Mortimer *et. al.*, 2014b).

De acordo com Mortimer *et. al.* (2014b), a proposição de um novo PC deve considerar alguns pré-requisitos básicos para que seja relevante sua elaboração, de modo a colaborar dentro do contexto de ensino-aprendizagem do conceito em sala de

aula de Ciências. Em geral, considera-se fatores como a centralidade do conceito em uma dada ciência, sua polissemia e relações com uma rede de outros conceitos (Baltieri, 2020). Ainda, a identificação de problemáticas associadas com obstáculos de aprendizagem de natureza epistemológica, ontológica e axiológica, pode justificar a elaboração de um novo PC como ferramenta com potencial para contribuir para elaboração de processos educativos que levem em conta a polissemia em torno do conceito (Santos; Santos, 2023).

Tendo em vista esses fatores atrelados ao conceito da **Ligação Covalente (LC)** e seu ensino, Baltieri (2020) propôs a elaboração de um PC que retratasse a heterogeneidade em torno do conceito. Em sua investigação, o autor aponta que a LC é um conceito central na Química, tendo em vista seu papel em explicações de fenômenos e propriedades, sendo de relevante importância para o entendimento e aplicação adequados de tais. Diferentes teorias e modelos que buscaram explicar a Ligação Química e a LC são identificadas no decorrer da história e filosofia das Ciências, e tais são caracterizadas a partir compromissos epistemológicos e ontológicos próprios. No ensino da LC, essas diferentes teorias e modelos podem contribuir, em contextos adequados, para compreender fenômenos e propriedades de moléculas, compostos e substâncias. No entanto, como observado pelo autor em sua revisão da literatura de Concepções Alternativas (CA), estudantes fazem um uso indiscriminado e descontextualizado dos diferentes significados do conceito, utilizando compromissos, características e conceitos de distintas teorias e modelos da ligação sem um discernimento ou compreensão de suas particularidades. Dessa forma, observa-se que muitas das problemáticas associadas ao ensino-aprendizagem do conceito são decorrentes da combinação de conceitos e concepções com compromissos epistemológicos e ontológicos incompatíveis ou mesmo contraditórios. Dessa forma, o autor aponta sobre a potencialidade de um PC da LC como ferramenta a ser considerada na idealização e planejamento de processos educativos que contemplem a polissemia do conceito e destaquem as características e diferenciação das distintas formas de se conceber o conceito, bem como evidenciar possíveis contextos adequados de utilização dessas formas.

Para a investigação dos compromissos que estabilizam as diferentes formas de conceber a LC, Baltieri (2020) se valeu de três principais fontes de dados: obras da literatura secundária da história e filosofia das Ciências, pesquisas acerca da concepção de estudantes sobre o conceito de LC e um questionário, aplicado a

estudantes do Ensino Superior de um curso de Química. Dessas fontes de dados, buscou identificar e relacionar os diferentes compromissos epistemológicos e ontológicos atrelados às diferentes formas de se conceber o conceito.

Em sua pesquisa, Baltieri (2020) vislumbrou fortes correlações entre os dados encontrados nas diferentes fontes, o que possibilitou uma primeira proposta das zonas e o PC da LC. No entanto, o autor aponta uma preocupação acerca da possibilidade de outros significados ou compromissos não terem emergido da aplicação do questionário devido ao baixo número de respondentes: apenas quatro estudantes participaram dessa etapa. Tendo em vista a discrepância com a extensa e incessante exploração das demais fontes, levanta a hipótese de que novas correlações podem ter ficado de lado, e uma nova aplicação, para um maior e mais plural número de respondentes, poderia contribuir na constituição de um PC da LC mais robusto e com zonas bem estabelecidas.

Partindo dessa hipótese e da potencialidade heurística do PC da LC, a presente pesquisa foi elaborada de modo a contribuir para o estabelecimento do perfil, a partir de uma revisão ampliada do domínio microgenético, e também explorá-lo como ferramenta de análise para contextos de ensino-aprendizagem. Para isso, foram investigados como diferentes formas de conceber a LC surgem em dois contextos: no pensamento verbal de estudantes de Química no Ensino Superior, durante a resolução de problemáticas envolvendo o conceito; e nos discursos textuais em **Livros Didáticos (LD)** usados no ensino de Química Inorgânica, na modalidade do Ensino Superior, em disciplinas que objetivam abordar aplicações possíveis da LC em explicações de propriedades de compostos e fenômenos químicos e físicos.

De modo a apresentar os aportes teóricos e metodológicos que fundamentaram todo o desenvolvimento da pesquisa, o primeiro capítulo desta tese traz um apanhado histórico de como estes foram sendo concebidos e se estabeleceram dentro do Programa de Pesquisas em Perfil Conceitual, a partir de pesquisas que se propuseram a elaborar e explorar aplicações de um PC.

No segundo capítulo, é tratado especificamente as características do PC da LC, proposto por Baltieri (2020), a partir da descrição das principais etapas de coleta, análise e tratamento de dados envolvidas nessa pesquisa, seus principais achados e discussão de possíveis contribuições e aplicações ao Programa de Pesquisas em Perfil Conceitual, bem como possíveis lacunas e pontos a florescer no perfil.

O terceiro capítulo da obra traz características relacionadas a algumas das principais teorias e modelos da LC, a fim de discutir as diferentes formas que concebem o conceito, os compromissos epistemológicos e ontológicos característicos e a rede de conceitos própria que essas diferentes concepções se relacionam. Do diálogo com a literatura de CA de estudantes em torno do conceito, o capítulo também apresenta uma discussão de como o uso indiscriminado de características dos diferentes significados da LC podem levar a constituição de obstáculos ao ensino.

No quarto capítulo é descrito todo o percurso metodológico que constitui a pesquisa, justificando-se a escolha e aplicação das fontes de dados e dos instrumentos de coleta e análise, a partir dos objetivos e questão de pesquisa norteadores.

No quinto capítulo são mostrados e discutidos os principais resultados da análise das respostas dos estudantes ao questionário e dos trechos dos LD em que são aplicados os diferentes significados da LC para explicar problemáticas da Química.

Já no sexto capítulo, temos as considerações finais e gerais acerca dos achados em cada fonte de dados e como se relacionam para responder à questão de pesquisa, bem como apontados possíveis contribuições da atual pesquisa e perspectivas futuras para o Programa de Pesquisas em Perfil Conceitual.

1 A TEORIA DO PERFIL CONCEITUAL: VISITANDO ALGUMAS BASES TEÓRICAS E METODOLÓGICAS

As primeiras noções do que viria a se constituir a teoria do PC começaram a ser desenvolvidas por Mortimer (1995) como uma forma de modelar a heterogeneidade do pensamento em torno do conceito. Com uma inspiração inicial no PE de Bachelard (1979) para a disposição das diferentes formas de conceber um conceito em zonas, em um espectro crescente de complexidade, um PC reflete diferentes caminhos da construção do pensamento verbal (Vairo; Rezende; Filho, 2013). Atualmente, compartilha uma série de pressupostos com outros referenciais característicos da abordagem sócio cultural da aprendizagem de Ciências (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011). Nesse capítulo, são apresentados os fundamentos da teoria do PC, seus pressupostos teóricos e metodológicos, bem como exemplos de pesquisas que investigaram e aplicaram o PC como ferramenta de análise e planejamento, sobretudo no contexto de ensino-aprendizagem.

1.1 Origens da teoria do Perfil Conceitual

A teoria do PC concebe que diferentes formas de se pensar (verbalmente) acerca de um conceito podem coexistir em um sujeito (Mortimer, 1995). As primeiras discussões para a proposição de tal hipótese se inspiram no PE de Bachelard (1979), que apresenta doutrinas filosóficas construídas a partir de compromissos epistemológicos e que exprimem diferentes níveis de complexidade e aprofundamento científico para o modo de pensar um conceito.

Um PE é construído para um conceito designado e para um indivíduo e suas concepções sobre ele, sendo válido apenas para “um espírito particular que se examina num estado particular da sua cultura” (Bachelard, 1979, p. 25). No PE, as filosofias são colocadas em abcissas, com as ordenadas apresentando um valor que mede a frequência da utilização de uma noção (grosso modo, com finalidade de apenas representar a importância relativa das doutrinas nas convicções pessoais acerca do conceito). Como exemplo, Bachelard constrói seu próprio PE para o conceito de massa, como mostrado na Figura 1.

No PE mostrado na Figura 1, é possível notar que Bachelard coloca a noção racionalista clássica de *massa* como a de maior importância, o que associa com sua formação em Matemática clássica e seus anos de prática de ensino de Física elementar. Sua formação como cientista também o permite transitar em noções no

sentido mecânico relativista e diracana, porém aponta que, sem a cautela necessária, pode ser dominado por tendências racionalistas simples. Coloca relativa importância em noções empiristas, o que associa com a medição de massa em balanças, muito praticada por ele próprio no passado, em laboratórios de Química, mas também quando trabalhou em estação de correios. Por fim, aponta que, mesmo como um cientista, ele tem seus momentos realistas, em que adere a metáforas mais vagas sob massa.



Figura 1 – Perfil Epistemológico da noção pessoal de Bachelard sobre o conceito de massa.

Fonte: Bachelard (1979, p. 25).

Mortimer (1995) utiliza a ideia de doutrinas filosóficas do PE para construir as zonas de um PC, que representa os modos de pensar e formas de falar sobre um conceito. A construção dessas zonas no PC, no entanto, se dá não apenas pelas escolas filosóficas de pensamento, mas se utiliza dos compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos dos indivíduos (Dalri, 2010; Mortimer *et. al.*, 2014a).

Na teoria do PC,

Modos de pensar são aqui tratados como maneiras estáveis de contextualizar um dado tipo de experiência, pela sua atribuição a um entendimento de conceito socialmente construído. Em nossa aproximação, cada modo de pensar é modelado como uma zona em um perfil conceitual, estabilizado pelos compromissos ontológicos, epistemológicos e axiológicos fundamentados na construção de sentido de um conceito. Assim, não estamos lidando apenas com pensamentos conceituais de um indivíduo, mas em como isto é atribuído por um conjunto de comprometimentos socialmente

construídos, o que, por sua vez, fundamenta a atribuição de um significado particular a um conceito (Mortimer; El-Hani, 2014, p. 14 e 15, tradução livre¹).

Apesar da inspiração inicial no PE de Bachelard, posteriormente as bases filosóficas da teoria do PC se afastaram dessa primeira inspiração, passando a integrar “uma estrutura teórica que trata a aprendizagem de Ciências como a aprendizagem da linguagem social da Ciência escolar por meio de interações discursivas na sala de aula, analisadas em uma perspectiva sociocultural” (Mortimer; El-Hani, 2014, p. 2). Com essa integração, o PC passa a compartilhar alguns pressupostos teóricos característicos de teorias de abordagem socioculturais, que modificam a própria compreensão de conceito pela teoria do PC e influenciam as bases epistemológicas e metodológicas do programa de pesquisa. Nas próximas seções, discutimos algumas dessas bases e como são analisadas e utilizadas na construção e análise de PC.

1.2 O processo de formação de conceitos em uma perspectiva sociocultural

Na perspectiva de Vygotsky (2001), o processo de formação de um conceito e sua compreensão por um indivíduo está associado, entre outros processos, com a capacidade de **internalização** e **externalização** do mesmo.

Todo conceito é explicado por meio de símbolos, como palavras e ideias, e estes são carregados de significados, histórica e socialmente construídos dentro de um grupo. Quando um conceito é desconhecido por um sujeito, é da interação dele com outros indivíduos de seu grupo social que é possível a compreensão de seu significado, com essa interação mediada por signos compartilhados por todos os membros, de forma a garantir a comunicação. Como aponta Vygotsky (2001, p. 12), “a transmissão racional, intencional de experiências e de pensamentos a outrem exige um sistema mediador, que tem por protótipo a linguagem humana nascida da necessidade do intercâmbio durante o trabalho”.

Em uma cultura, os signos são representações de objetos, eventos e situações reais. O processo de internalização de um conceito consiste, pois, em um sujeito desenvolver representações mentais próprias (signos internos), que terão a função de

¹ Modes of thinking are treated here as stable manners of conceptualizing a given kind of experience, by ascribing to it a socially constructed meaning attributed to a certain concept. In our approach, each mode of thinking is modeled as a zone in a conceptual profile, stabilized by ontological, epistemological, and axiological commitments underlying meaning making about a concept. Thus, we are not dealing only with an individual's conceptual thinking, but with how it comes to be constrained by a set of socially constructed commitments, which in turn grounds the ascription of particular meanings to a concept.

servir como mediadores na sua compreensão de mundo e na comunicação com seus semelhantes (Oliveira, 1993; Vygotsky, 2001).

O processo de internalização de um objeto na forma de signos envolve uma relação dialética entre atividades internas e externas do sujeito, em um processo unitário na formação de um novo conceito. Da relação interpessoal com indivíduos de uma cultura, o aprendiz:

[...] realiza ações externas, que serão interpretadas pelas pessoas ao seu redor, de acordo com os significados culturalmente estabelecidos. A partir dessa interpretação é que será possível para o indivíduo atribuir significados a suas próprias ações e desenvolver processos psicológicos internos que podem ser interpretados por ele próprio a partir dos mecanismos estabelecidos pelo grupo cultural e compreendidos por meio de códigos compartilhados pelos membros desse grupo (Oliveira, 1993, p. 38 e 39).

Essa relação dialética entre atividades internas e externas forma uma das bases da lei genética geral do desenvolvimento cultural de Vygotsky, que postula que o desenvolvimento do pensamento individualizado, assim como das outras funções psicológicas, se dá em uma trajetória “de fora para dentro”, da atividade social, intersíquica, para a atividade individual e intrapsíquica. É da interpretação de sua fala por outros membros de uma cultura que um indivíduo consegue desenvolver a linguagem como instrumento de pensamento, possibilitando a evolução de um discurso interno (Oliveira, 1993; Vygotsky, 2001).

Quando esse indivíduo compreende “o significado de um conceito, internalizado e usado por outros indivíduos de seu grupo social, passa a ser uma representação mental que serve como signo mediador da sua compreensão de mundo” (Oliveira, 1993, p. 36). Ainda, de acordo com Vygotsky (2001), não há uma transferência automática dos conteúdos que ele teve contato por outros para sua consciência, mas um processo de transformação, de reconstrução da atividade psicológica, sendo mediada por operações com signos.

Na formação de conceitos, o signo que media todo processo é a palavra, e o **significado** de uma palavra é o que possibilita a organização do mundo real e a comunicação social. Em relação ao significado de uma palavra para Vygotsky, Oliveira (1993) aponta dois componentes: o **significado** propriamente dito e o **sentido**. No significado, se insere um sistema de relações objetivas, que se formou social e historicamente no desenvolvimento da palavra e é utilizado para a comunicação social. Já sentido, a autora coloca como sendo um componente da palavra voltado

para o próprio indivíduo, construído de maneira personalizada a partir dos contextos vivenciados por ele em que a palavra foi utilizada.

Por essas definições, podemos extrair que a temporariedade relacionada com sentido e significado também diferem. Sentido apresenta um caráter mais imediatista, instantâneo e provisório. Durante um diálogo, por exemplo, membros podem chegar a uma concordância para o sentido de uma palavra, de modo que este medeie as relações sociais e a comunicação para aquele evento. Mudam-se os interlocutores ou o evento, muda-se também o sentido. Já o significado de uma palavra possui maior estabilidade e precisão, sendo social e historicamente construído e compartilhado. Apesar dessa maior estabilidade, o significado de uma palavra não é cristalino, sendo reconstruído e evoluindo histórica e culturalmente, a partir das relações da humanidade com o mundo físico (Oliveira, 1993; Vygotsky, 2001).

Por Vygotsky (2001), podemos conceber que o significado se coloca como um fenômeno tanto linguístico quanto de pensamento. O significado como um elo, que une pensamento e fala em **pensamento verbal**, é apontado por Vygotsky (2001, p. 119):

Uma palavra sem significado é um som vazio; portanto, o significado é um critério da palavra e um seu componente indispensável. Pareceria, portanto, que poderia ser encarado como um fenômeno linguístico. Mas do ponto de vista da psicologia, o significado de cada palavra é uma generalização, um conceito. E, como as generalizações e os conceitos são inegavelmente atos de pensamento, podemos encarar o significado como um fenômeno do pensar. No entanto, daqui não se segue que o pensamento pertença a duas esferas diferentes da vida psíquica. O significado das palavras só é um fenômeno de pensamento na medida em que é encarnado pela fala e só é um fenômeno linguístico na medida em que se encontra ligado com o pensamento e por este é iluminado. É um fenômeno do pensamento verbal ou da fala significante - uma união do pensamento e da linguagem.

Quando um sujeito entra em contato com uma palavra pela primeira vez, por meio de interações sociais e mediado semioticamente pela linguagem, esta ainda não possui sentido, ou seja, um significado pessoal ainda não fora construído. Em um primeiro momento, deve ser apresentado ao aprendiz o significado daquela palavra que é compartilhado pelo grupo social em que está inserido. É a partir da mediação da linguagem em relações sociais que um aprendiz consegue se apropriar de uma cultura de maneira externa, para então internalizá-la e construir, gradativamente, um sistema de signos próprios e subjetivos, em sua consciência (Vygotsky, 2001).

Assim, temos que “quando um indivíduo aprende o significado de um conceito, internalizado e usado por outros indivíduos de seu grupo social, passa a ser uma

representação mental que serve como signo mediador na sua compreensão de mundo” (Oliveira, 1993, p. 36).

Podemos tirar disso que o significado de uma palavra se coloca como uma generalização, “uma potencialidade que tem diversas realizações no discurso” (Vygotsky, 2001, p. 144). Como construto social e histórico, é a zona mais estável e precisa do sentido de uma palavra, é o que torna possível a intersubjetividade e a comunicação entre dois ou mais membros de um grupo social. Isto pois, embora os sentidos atribuídos a uma palavra por dois sujeitos difiram, assim como também se modificarão em um outro contexto, o significado da palavra pode ser **compartilhado** por eles. E, desse modo, a palavra se torna a portadora do conceito (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011).

Na abordagem dos PCs, a teoria de desenvolvimento das funções mentais de Vygotsky traz pressupostos teóricos para o entendimento de “conceito” e como se dá seu “domínio”, além de serem utilizados para análise da aprendizagem (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011). Para nossas discussões, focamos nas contribuições destes pressupostos para o primeiro caso.

1.3 Conceituação e a visão sociointeracionista de domínio de conceito

Na teoria de PC, a própria visão do que é um conceito e como se dá seu **domínio** por um sujeito deriva das ideias de internalização e externalização, em par dialético, e da lei genética geral do desenvolvimento cultural (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011).

As teorias que adotam a perspectiva sociointeracionista na aprendizagem, na qual o PC se insere, se apoiam na ideia de Vygotsky (2001) de que o desenvolvimento das funções psicológicas superiores se dá no âmbito social. Esse desenvolvimento é marcado nas interações de um sujeito em desenvolvimento, como um aluno ou uma criança, com um sujeito mais desenvolvido, como um professor ou um adulto. Com isso, é possibilitado ao aprendiz a reconstrução interna (no plano intrapsicológico) de uma atividade externa, social (plano interpsicológico), em uma dialética explicitada em sua lei genética geral do desenvolvimento cultural, e que se dá como resultado de processos interativos, mediados por signos.

A perspectiva adotada pelo PC concebe **conceito** como estruturas linguísticas externas, que existem apenas como construtos sociais, dentro de uma linguagem ou de um sistema de saberes estruturados, como a Ciência, por exemplo. Assim,

conceitos podem ser encontrados em textos e no campo linguístico, mas não podem se tornar estruturas totalmente internalizadas na mente dos indivíduos (Mortimer; El-Hani, 2014a).

Na teoria do PC, ao invés de se pensar em conceitos como entidades mentais, se aborda a ideia de “processos mentais de **conceituação**, que são fundamentadas em processos cerebrais, mas não redutíveis a eles” (Mortimer; El-Hani, 2014, p. 6, tradução livre²). Processos de conceituação se relacionam com o **pensamento conceitual**, uma das funções psicológicas apontadas por Vygotsky. Eles se caracterizam pela natureza social, produzido da interação entre um indivíduo e um evento externo, não podendo ser o pensamento conceitual inteiramente interno ao sujeito (El-Hani; Silva Filho; Mortimer, 2014).

Por essa perspectiva, em um primeiro momento pode parecer existir uma contradição entre a perspectiva de conceituação adotada nos PC e a ideia de internalização em Vygotsky como uma reconstrução interna de atividades externas. No entanto, a interpretação de internalização de Vygotsky, como discutido na seção anterior, deve levar em conta a **dialética** existente entre atividades internas e externas. Nessa dialética, rejeita-se a possibilidade de atividades externas serem integralmente internalizadas por um sujeito, assim como também atividades internas não podem “ser inteiramente externalizadas na forma de artefatos instrumentais ou ações estruturadas” (Mortimer; El-Hani, 2013, p.3). Temos ainda que processos psicológicos internos e processos sociais externos possuem relações estruturais e funcionais, se influenciando e retraindo características uma das outras durante sua construção (Mortimer; El-Hani, 2013). Pela interpretação dialética do processo de internalização, a atividade externa não pode ser transferida em integralidade para um plano interno mental, mas pode ser transformada, mediada por mecanismos semióticos, na criação de planos internos. Desta transformação, Mortimer e El-Hani (2013, p. 4) retiram que “processos psicológicos internos não são idênticos à fala externa porque a internalização não é transferência, mas transformação da estrutura e das funções dos processos sociais que dão origem aos processos psicológicos”.

Como conceitos são, na abordagem de PC, construtos sociais, estes se encontram no plano externo e, durante a aprendizagem, são internalizados no plano

² Processes of conceptualization, which are grounded on brain processes, but are not reducible to them.

interno, porém não em sua integridade, mas sua **potencialidade** de emergência em contextos de aplicação (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011; Mortimer; El-Hani, 2013).

Um indivíduo “possuir” um conceito em sua mente não se resume na capacidade de ele internalizá-lo na forma de estruturas mentais, que podem ser posteriormente socializadas como se “lidas em voz alta”. O domínio de um conceito por um indivíduo se relaciona com a capacidade que ele tem de socializá-lo, em uma dialética entre os planos internos e externos: a internalização do conceito se encontra atrelada à construção e ao desenvolvimento do plano intrapsicológico, e sua externalização se dá quando o sujeito usa deste plano desenvolvido para a interpretação de experiências. Quanto mais contextos e experiências em que utiliza os conceitos aprendidos, o pensamento conceitual se torna mais desenvolvido e amplia-se a potencialidade de ele operar de maneira similar em experiências percebidas como similares (aspecto de **permanência**). Isso imprime à aprendizagem uma dimensão de processo contínuo (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011; Mortimer; El-Hani, 2013).

Quando funções mentais emergem, o que observamos é uma transição da potencialidade à realidade. Nesses termos, podemos assumir a existência de estruturas no cérebro que são necessárias à emergência de funções mentais mas, como é a potencialidade de sua emergência que é internalizada, estas estruturas não são conceitos que podem ser lidos em voz alta, mas condições necessária para a emergência ou realização do pensamento conceitual, o qual lida, em sua estabilidade, com conceitos socialmente construídos que estão disponíveis ao sujeito em decorrência da aprendizagem. Desta perspectiva, funções mentais são sociais em sua gênese e permanecem sociais durante toda nossa vida como seres psicológicos (Mortimer; El-Hani, 2013, p. 4-5).

É dessa repetição de emergência de funções mentais em que se constitui o pensamento conceitual que é possibilitada a comunicação efetiva entre sujeitos em uma cultura, quando compartilham de significados em comum para uma palavra. Como descrito na seção anterior, o significado, social e historicamente construído para uma palavra, se apresenta como uma generalização e se torna portador do conceito (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011).

Como apontado por Mortimer, Scott e El-Hani (2011, p. 114), “aprender um conceito é aprender seu significado, generalizar, passar de sentidos pessoais para significados socialmente aceitos”. Embora sentidos sejam construídos de maneira intrasubjetiva por um sujeito, a interação com significados histórico-culturais em processos sociais ao longo de seu desenvolvimento, sobretudo dentro de ambientes educacionais, leva a uma plena formação e maior estabilidade do pensamento

conceitual. Como significados são construtos sociais, a tendência que se observa é que a produção de sentidos fica restringida aos significados socialmente aceitos, conferindo a característica de permanência em nosso pensamento conceitual, o que possibilita a comunicação social.

Conceitos e conceitualizações estabelecem entre si uma relação dialética, tal como capturada na relação entre significado (próprio dos conceitos) e sentido (produzido pelo pensamento conceitual ou conceitualização). De acordo este modo de entender os conceitos, é graças à restrição da produção de sentidos pelos significados socialmente estabilizados que nos tornamos capazes de pensar conceitualmente de modo tão repetível que terminamos por conceber os conceitos como entidades mentais estáveis (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011, p. 115).

Como abordado nesta seção e na anterior, o significado de uma palavra é o que possibilita o compartilhamento do que duas ou mais pessoas entendem por um conceito. O uso desse significado em diferentes contextos para significar experiências leva a um desenvolvimento e estabilidade no pensamento conceitual, aumentando a potencialidade de operar de maneira similar em experiências futuras.

O PC traz uma tentativa de gerar novos entendimentos no ensino de Ciências, considerando-se a relação entre os modos de pensar e formas de falar acerca de um conceito. Reconhece-se a possibilidade de coexistência de uma diversidade de entendimentos para um mesmo conceito, que derivam das experiências sociais, que são diversas e multifacetadas, em que este conceito foi se formando no desenvolvimento do sujeito (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011; Mortimer *et. al.*, 2014a).

Como apontado por Mortimer, Scott e El-Hani (2011, p. 116), na teoria de PC, “modos de pensar são tratados como elementos de permanência no pensamento conceitual dos indivíduos, intimamente relacionados a significados socialmente construídos que podem ser atribuídos aos conceitos”. Os diferentes modos de pensar acerca de um conceito são representados pelas zonas do PC, como abordado na primeira seção deste capítulo, e o perfil pode ser usado como ferramenta para auxiliar na análise desses modos.

Os diferentes significados poderão ter maior ou menor peso para o indivíduo a depender dos contextos em que foram utilizados para significar experiências e a extensão que tiveram em seu próprio desenvolvimento pessoal. Os desafios em que determinado significado foi utilizado para serem superados, a frequência com que emergem para significar a experiência, entre outros fatores, implica em uma maior estabilidade que um significado se encontra para um sujeito. No entanto, a teoria do

PC não coloca que um significado mais estabilizado se torna único para um indivíduo, “superando” os demais. Em oposição a teorias que apontam uma mudança conceitual (Posner *et al.*, 1982), a teoria do PC reconhece a coexistência de diferentes significados e que estes são acessados preferencialmente a depender do contexto em que uma experiência com o conceito se apresenta (El-Hani; Silva Filho; Mortimer, 2014).

Como ferramenta de análise dos modos de pensar um conceito, a construção de um PC deve levar em conta, além da variedade de significados atribuídos a um conceito, diferentes contextos em que estes significados são produzidos. Na análise destes contextos, busca-se por compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos que estabilizem “modos de pensar e falar sobre os conceitos e, assim, tornam possível individuar zonas para a construção de um perfil” (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011, p. 116). Deve-se buscar pelos dados relativos à produção de significado em pelo menos três dos quatro domínios sociogenéticos considerados por Vygotsky: sociocultural, ontogenético e microgenético (Mortimer; Scott; El-Hani, 2011). Na próxima seção, apresentamos brevemente cada um desses domínios e como podem ser investigados na construção de PC.

1.4 Domínios genéticos de Vygotsky e produção de significado em diferentes contextos

Na abordagem de Vygotsky da formação da mente, destaca-se o papel do social. Sobre essa aproximação sociocultural, Wertsch (1985) traz apontamentos sobre a compreensão da mente humana, seus processos de formação e desenvolvimento, a partir da abordagem do meio social e material. Nesses apontamentos, o indivíduo interage com o cenário sociocultural em que se insere, como elementos complementares e indissociáveis para compreensão dos processos mentais humanos.

No desenvolvimento humano, que inclui a evolução de suas características afetivas, cognitivas, sociais e motoras, no cérebro se encontra a base biológica das funções psicológicas. Porém, estas, sobretudo as funções ditas superiores, se edificam nas relações sociais (Vygotsky, 2001).

O desenvolvimento não se resume a processos de maturação biológicos, mas também nas práticas e interações com cultura e sociedade, em uma relação dialética entre a base biológica e os processos sócio-históricos. Sobre esta concepção, Moura

et al. (2016, p. 107) postulam que “o sujeito é produto do desenvolvimento de processos físicos e mentais, cognitivos e afetivos, internos (história anterior do sujeito) e externos (situações sociais do desenvolvimento no qual o sujeito está envolvido)”.

No método genético de Vygotsky, os **domínios genéticos** abordam as transformações e formação da mente humana levando em conta os aspectos: de maturação biológica, como desenvolvimento e maturação de estruturas cerebrais; de ordem histórica, do indivíduo e sua espécie; e, também, os sociais, nas interações do indivíduo com os processos sócio-históricos. Esses aspectos não podem, individualmente, levar ao desenvolvimento humano, mas em dialética, influenciando-se, e também em dialética devem ser estudados os domínios genéticos a fim de compreender os processos mentais humanos (Werstch, 1985).

Werstch (1985) descreve quatro planos genéticos, sendo três deles apontados nominalmente nos estudos de Vygotsky (filogenético, ontogenético e sociogenético) e o quarto (microgenético) derivado desses estudos, mas cuja nomenclatura foi cunhada por Werstch. Em linhas gerais, o plano filogenético está associado com a história da espécie, ontogenético, com a história do próprio indivíduo, sociogenético, do grupo cultural, e o microgenético, com formações que se dão em processos psicológicos de curto prazo. Para cada domínio genético, Vygotsky apresenta o traço dominante do comportamento que opera nestes e seus diferentes princípios explanatórios.

Na construção de um PC, Mortimer *et. al.* (2014a, p. 16) argumentam que é necessário:

Que consideremos uma variedade de contextos de produção de significados, incluindo pelo menos três dos quatro domínios genéticos considerados por Vigotski em seus estudos sobre as relações entre pensamento, linguagem e formação de conceitos, a saber, os domínios sócio-cultural, ontogenético e microgenético. O que se busca nos dados relativos à produção de significado nestes domínios genéticos são compromissos ontológicos e epistemológicos que estabilizam modos de pensar e falar sobre os conceitos e, assim, tornam possível individuar zonas para a construção de um perfil.

Assim, descrevemos algumas características dos domínios sociocultural, ontogenético e microgenético, e alguns métodos de coleta de dados tradicionalmente utilizados dentro do programa de pesquisas em PC para buscar os compromissos ontológicos, epistemológicos e axiológicos nesses domínios.

No domínio sociocultural, descreve-se o processo de desenvolvimento histórico do comportamento humano, analisando as influências da esfera social, sobretudo no

desenvolvimento das funções psicológicas superiores. O ser humano é analisado dentro da espécie humana, não se desenvolvendo por simples estímulos do ambiente, atrelados à esfera biológica, e nem se desenvolvendo interna e isoladamente. É nas experiências sociais e históricas que se dá a fixação de conquistas e aprendizados da espécie, mediado por símbolos por um outro sujeito, mais experiente. Para a mudança genética nesse domínio, Vygotsky associa com a descontextualização dos meios de mediação, isto é, com a crescente independência da necessidade de um contexto espaço-temporal para se acessar os significados dos símbolos utilizados (Werstch, 1985).

Na teoria do PC, a busca por compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos dentro do domínio sociocultural se dá em uma tentativa de obter informações sobre a gênese de um conceito e a evolução (não-linear) de sua compreensão ao longo da história. Metodologicamente, essas informações são buscadas usualmente em fontes secundárias da história da Ciência, em um levantamento histórico das concepções e significados associados (Mortimer *et. al.*, 2014b).

O domínio ontogenético está associado com a evolução de um indivíduo dentro de uma espécie, e essa evolução se dá na fusão e coincidência entre os planos natural e cultural, formando uma única linha de desenvolvimento sociobiológico de sua personalidade. Dessa maneira, o comportamento deve ser explicado levando em conta aspectos cognitivos, de maturação do sistema nervoso, e em aspectos sociais. As esferas natural e cultural estão sempre se influenciando na formação de personalidade do indivíduo: forças culturais transformam a linha natural com o amadurecimento, e a maturação em mecanismos orgânicos, sobretudo neurofisiológicos, representa pré-condição do aprendizado (Werstch, 1985).

Para esse domínio, Mortimer *et. al.* (2014b) apontam que as pesquisas em PC buscam compreender como o conceito é aprendido e como esse aprendizado evolui na história de um sujeito. Para obter tais informações, a pesquisa normalmente recorre a estudos sobre aprendizagem, como pesquisas sobre concepções alternativas dos alunos em Ciências, que possibilitam o acesso a noções do cotidiano do aluno sobre determinado conceito e suas ideias frequentemente usadas em diferentes contextos. Os autores também apontam que a análise de LD e mesmo de episódios em sala de aula podem contribuir para auferir as informações nesse domínio.

Por fim, o domínio microgenético “é caracterizado pela emergência do psiquismo individual no cruzamento dos fatores biológico, histórico e cultural, sendo crucial na questão da afetividade e no conceito de personalidade” (Moura *et al.*, 2016, p. 111). A análise microgenética centra-se principalmente na gênese de um evento particular, que se dá em um tempo curto, relativo ao processo de desenvolvimento do comportamento do indivíduo, como aprender um som ou uma nova palavra (Moura *et al.*, 2016).

Werstch (1985) apresenta dois tipos de análise nesse domínio. No primeiro, abarca-se a formação de processos psicológicos de curto prazo, com o estudo destes requerendo a observação e foco no processo de aprendizagem, e não aos resultados finais de experimentações sucessivas. No segundo tipo, desdobra-se na observação da percepção ou conceituação pelo indivíduo.

Pela análise microgenética, é possível investigar como situações de aprendizagem em particular influenciam a atividade de funções mentais superiores. Nessa investigação, identifica-se os momentos de transição genética, do intersubjetivo para o intrasubjetivo, ou seja, quando o indivíduo menos experiente internaliza modos de funcionamento, outrora intermediados por outro mais experiente, e que agora a intermediação não se torna mais necessária (Moura *et al.*, 2016).

Na teoria do PC, a investigação do domínio microgenético se dá, usualmente, pela observação de situações em que os alunos interagem e podem expressar suas ideias sobre um conceito. Os principais métodos para obter essas concepções informais dos alunos envolvem estudos longitudinais, como análise de episódios em sala de aula, entrevistas e questionários (Mortimer *et. al.*, 2014b).

Vale destacar que as relações entre domínios genéticos e os tipos de fontes de dados não se dão de uma maneira linear e bem estabelecida. Em realidade, diferentes fontes de dados podem fornecer informações acerca de diferentes domínios, e a articulação entre os dados oriundos de diferentes fontes se mostra etapa relevante para estabelecer as ideias de cada domínio investigado.

Como Mortimer *et. al* (2014b) destacam, o estudo da heterogeneidade de modos de pensar e formas de falar sobre um conceito deve, necessariamente, envolver um diálogo entre os dados obtidos entre os domínios genéticos. Análises individuais extensivas de dados históricos e filosóficos não terão sentido sem o tratamento em conjunto com dados empíricos, e vice-versa. É a interação entre os domínios aqui apresentados que possibilita o estudo da gênese do conceito e sua

variedade de significados em diferentes contextos, a fim de se construir um PC como modelo forte e coerente de representar a heterogeneidade de se pensar e falar acerca do conceito.

1.5 Bases metodológicas na construção de um Perfil Conceitual

O PC surge como uma tentativa de gerar novos entendimentos no ensino de Ciências em sala de aula, considerando a relação entre discurso e pensamento de alunos e professores. Ele vem em contraponto à ideia de que estudantes, ao aprenderem uma nova teoria que explique de maneira mais próxima do que é aceito na comunicação científica atualmente, rompem por completo com as teorias e entendimentos que possuíam anteriormente (Mortimer, 1995; Mortimer *et. al.*, 2014a).

Na teoria do PC, entende-se que as concepções cotidianas e as ideias alternativas em estudantes – e mesmo em pessoas com formação científica – são pessoais, bastante resistentes a mudanças e fortemente influenciadas pelo contexto em que um conceito é abordado. Com isso, se torna inviável esperar uma substituição de noções cotidianas por científicas, com total rompimento das segundas. Para um aprendizado científico mais efetivo, uma estratégia seria buscar tornar o aluno consciente de seu próprio PC e que consiga compreender as possibilidades de aplicação e a dependência com o contexto no emprego dos diferentes significados (Amaral; Mortimer, 2001; Mortimer, 1995, Picón; Sevia; Mortimer, 2020).

Na teoria do PC, entende-se que a forma de falar mais adequada acerca de um conceito depende do contexto de aplicação. Reconhece-se o valor cultural das noções de senso comum do aluno, e estas podem inclusive ser mais adequadas e úteis que noções científicas, em determinados contextos. O que a teoria do PC busca, então, é contribuir de forma que o sujeito se torne ciente das zonas de seu próprio PC e adquira capacidade de julgar qual a noção ou corpo de noções mais adequadas para uma situação circunstanciada (Mortimer *et. al.*, 2014a).

As zonas de um PC devem ser constituídas a partir de compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos e fundamentadas a partir da análise de dados provenientes de três dos domínios genéticos de Vygotsky: sociocultural, ontogenético e microgenético. Para propor a criação de um PC para um conceito, a primeira etapa consiste em analisar a própria validade e necessidade dessa construção. Para isso, Mortimer *et. al.* (2014b) sugerem requisitos básicos para avaliar esses aspectos acerca de um conceito, como: ser um conceito central em uma dada

Ciência; deve ser polissêmico suficiente para que seja válida a construção de um PC para ele; e ser identificado em diferentes contextos, escolares ou não, a partir de seus diferentes significados.

Depois de avaliado se o conceito contempla esses requisitos, a proposição das zonas requer o estabelecimento dos compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos que as definem e as estabilizam, de forma que sejam representativas de modos particulares de se pensar acerca de um conceito. O levantamento desses compromissos, em geral, se dá a partir da investigação e articulação de dados oriundos dos domínios sociocultural, ontogenético e microgenético (Picón; Sevia; Mortimer, 2020).

No desenvolvimento do PC de um conceito, uma interessante ferramenta para organizar os diferentes significados atribuídos a um conceito é a Matriz Semântica. No Programa de Pesquisas em PC, Sepulveda (2010) utilizou uma ferramenta com esse objetivo, construída a partir dos compromissos epistemológicos e ontológicos identificados na investigação dos domínios ontogenético, sociocultural e microgenético para o conceito de Adaptação. Foi nomeada pela autora como “Matriz Epistemológica”, mas em pesquisas mais recentes o termo mais comumente utilizado passa a ser Matriz Semântica, uma vez que não se restringe aos compromissos epistemológicos, mas todos que contribuem na construção da polissemia de um conceito.

Em um primeiro momento, a Matriz Epistemológica para o conceito de adaptação foi construída para organizar e caracterizar “os temas epistemológicos a partir dos quais a polissemia em torno do conceito de adaptação pode ser ordenada” (Sepulveda, 2010, p. 64). Cada tema epistemológico foi constituído por compromissos epistemológicos e ontológicos envolvidos na significação do conceito, e da combinação desses compromissos que as zonas do PC de adaptação foram formuladas. Dado o grau de polissemia do conceito, Sepulveda (2010) aponta a construção da matriz como um passo metodológico que se mostrou fundamental na constituição das zonas do PC de adaptação. Pode-se observar a construção de uma Matriz Semântica como um importante passo metodológico para a proposição de outros PC mais recentes, como para o PC de Herança Biológica (Reis, 2018) e Ligação Covalente (Baltieri, 2020).

Além do uso nas etapas de construção e proposição de zonas de PC, a Matriz Semântica se mostrou uma ferramenta com grande potencial heurístico, sendo

atribuídas novas utilidades. Durante o próprio desenvolvimento do PC de adaptação, Sepulveda (2010, p. 384) aponta a importância da caracterização prévia dos compromissos epistemológicos e ontológicos “para modelar a interanimação de vozes e a negociação de significados em torno das diferentes perspectivas de explicar a diversificação da forma orgânica, ao longo das interações discursivas em sala de aula”.

A autora também ressalta as variações na importância de cada tema epistemológico de acordo com o contexto de produção de conhecimento. Assim, a depender do contexto em que é aplicado o conceito, um ou mais temas podem se tornar mais relevantes que outros no processo de significação do conceito de adaptação.

Com as informações descritas nesta seção, podemos inferir que a construção de um PC para um conceito segue algumas orientações importantes, de modo que as zonas sejam diferenciáveis a partir de seus compromissos epistemológicos, axiológicos e ontológicos. Também é imprescindível uma boa escolha do conceito central do perfil, devendo ser relevante para o estudo de uma dada Ciência e apresentando uma pluralidade de sentidos a ele atribuído, de maneira que a construção de seu PC traga contribuições para um bom planejamento e análise de processos de ensino-aprendizagem.

1.6 Aplicações do Perfil Conceitual como ferramenta de análise

Após a construção de um PC, ele passa a ser uma ferramenta com potencial heurístico para analisar processos de ensino-aprendizagem, para além da organização e descrição de formas de falar típicos acerca de um conceito. Nesta seção, apresentamos algumas das principais aplicações de um PC desenvolvidas no programa de pesquisas.

Um PC bem desenvolvido pode ser importante ferramenta na organização e proposição de estratégias de ensino. A exaustiva exploração do desenvolvimento histórico de um PC, como recomendado durante sua construção, pode elencar obstáculos epistemológicos, ontológicos e axiológicos ao ensino. O desenvolvimento de uma estratégia de ensino pode ser melhor organizado a fim de evitar ou de preparar o professor para o surgimento de tais obstáculos. Além disso, o próprio estudo do desenvolvimento histórico do conceito pelo professor pode auxiliar na delimitação de

termos, ideias centrais e limitações das principais teorias em torno do objeto de estudo (Mortimer *et. al.*, 2014b).

Nesse contexto, Santos e Santos (2023) revisaram pesquisas na área que “implementaram intervenções para analisar processos de ensino e aprendizagem com o aporte da teoria dos perfis” (Santos; Santos, 2023, p. 3). Dessa análise, os autores puderam levantar diversas contribuições de um PC nas etapas tidas como basilares no planejamento didático-pedagógico: “a definição de objetivos, conteúdos, metodologia, estratégias didáticas e modos de avaliação em uma intervenção” (Santos; Santos, p. 2). Pode-se citar como contribuições encontradas pelos autores:

- objetivos pedagógicos atrelados à mobilização ou aquisição de novas zonas de um PC pelos estudantes. Com isso, as intervenções são aplicadas de modo que estudantes explorem significados do conceito mais próximos das teorias científicas contemporâneas;

- planejamento da intervenção centrado no PC, tido que o perfil pode ser usado para “orientar a abordagem de conteúdos conceituais, procedimentais e atitudinais, visto que os conceitos perfilados assumem um papel central na organização dos conteúdos de uma disciplina, e que as zonas desses perfis possibilitam estruturar o entendimento de diversos conteúdos” (Santos; Santos, 2003, p. 9);

- com relação à escolha das metodologias de ensino, a associação com um PC é caracterizada pelo uso de metodologias que priorizem diversidade de contextos de aplicação;

- compromissos epistemológicos e ontológicos que constituem as zonas do PC podem servir de indicadores de quais melhores estratégias didáticas a serem utilizadas no planejamento. Por exemplo, se o planejamento busca a mobilização de uma zona em que o conceito é dado como concreto para zonas em que é tido como abstrato, os compromissos ontológicos associados podem orientar as estratégias para alcançar tal mobilização;

- já com relação aos modos de avaliar uma intervenção, analisar quais zonas os alunos conseguem mobilizar antes e após a intervenção, bem como a potencialidade de usar significados de diferentes zonas a depender do contexto, podem ser contribuições a partir de um PC.

Tal utilização para o PC pode ser encontrada em Moralles (2021), em que o PC de átomo orientou uma das etapas do desenvolvimento de uma Unidade Didática Multiestratégica acerca de teorias atômicas e comportamento de materiais. Em

Rezende (2019), após analisar como as zonas do PC de Vida emergiam nas respostas de alunos de ensino médio, o autor desenvolveu atividades com intuito de que diferentes zonas do PC fossem abordadas por estudantes, de modo a possibilitar a tomada de consciência de seu próprio PC e a evolução conceitual dos sujeitos. De acordo com Mortimer (1996), na tomada de consciência por um sujeito de seu próprio PC para um conceito, é possível o desenvolvimento de um recurso para uma aprendizagem mais significativa. Isto porque, com esta conscientização, o próprio aluno pode identificar diferentes visões de mundo acerca de um conceito, suas limitações, obstáculos e passar, então, a utilizar com melhor coerência uma visão dentre outras possíveis para uma situação ou contexto de aplicação.

O PC também possibilita a análise da *evolução conceitual* de um sujeito ou grupo, observando modificações e permanência das zonas de um perfil que são utilizadas por este conceito. Acerca da evolução do PC, Viggiano e Mattos (2007, p. 3) apontam:

Supomos que a ativação de determinadas zonas de perfil conceitual é necessariamente definida pelo contexto de uso destas. No mesmo perfil conceitual, as diferentes zonas são utilizadas em diferentes contextos. Estas zonas, na nossa compreensão, são constituídas além da dimensão epistemológica e da ontológica pela dimensão axiológica. Sendo a evolução do perfil conceitual considerada como a inserção de uma nova zona ou mesmo a modificação das zonas preexistentes, bem como a mudança na relação de prevalência entre cada uma das dimensões, isto é, qual alteração em uma das dimensões de uma zona de perfil. Além disso, consideramos que a evolução pode ser entendida a partir da mudança de utilização das zonas de perfil conceitual em contextos similares, isto é, em contextos que antes do processo de ensino-aprendizagem se utilizava uma determinada zona, após o processo a utilização será de outra zona de perfil. Entendemos aqui, processo de ensino-aprendizagem qualquer processo que modifique o conhecimento do indivíduo embasado na interação social, seja em um ambiente formal ou não-formal.

Coutinho (2005) utilizou do PC de Vida para verificar a evolução conceitual de estudantes sobre o tema, ao longo de um curso de graduação em biologia. Para isso, foram construídos PC de alunos de diferentes períodos de um curso de biologia, a fim de verificar a permanência ou não das zonas do PC de Vida em diferentes etapas do processo de escolarização. Com os resultados, pode verificar que diferentes zonas eram acessadas preferencialmente na definição de Vida e sua utilização em situações-problema, para alunos de diferentes períodos do curso. Também é comum analisar a evolução do PC de alunos antes e depois da aplicação de atividades de ensino, como Lopes (2017), que analisou o perfil individual acerca do conceito de

átomo para alunos de Ensino Médio antes e depois do desenvolvimento de atividades experimentais de espectroscopia.

Por fim, outra importante aplicação do PC reside em sua potencialidade como ferramenta na análise de discurso .

A ideia de que um PC poderia ser usado para tal fim surge primeiro em Mortimer (2001), ao investigar modos de pensar e falar sobre “matéria” em salas de aula de Ciências. Utilizando do PC, o autor pôde estabelecer relações entre a produção de significado em sala de aula e os modos de falar e formas de pensar sobre o conceito que emergiam nos discursos de estudantes e professor.

Esse emprego para o PC se tornou um dos mais recorrentes em pesquisas do programa, sobretudo em contextos desenvolvidos em salas de aula.

Sepulveda (2010, p. 212) utilizou o PC de adaptação “para modelar a significação de explicações darwinistas para a diversificação da forma orgânica, no contexto do Ensino Médio de Biologia”. Com essa análise, a autora pode avaliar contribuições do modelo na “caracterização da interanimação de modos de pensar e formas de falar sobre a origem e diversidade das espécies ao longo de interações discursivas em sala de aula “(Sepulveda, 2010, p. 212).

Diniz Júnior, Silva e Amaral (2015) buscaram identificar as zonas do PC de Calor que emergiam na fala de professores de Química, durante episódios de ensino-aprendizagem em sala de aula de Ciências. Com tal identificação, os autores buscavam evidenciar quais visões epistemológicas acerca do conceito eram priorizadas e quais eram preteridas por esses professores, buscando traçar implicações com o conhecimento científico abordado em sala de aula.

Esses são dois exemplos de uso de PC para análise discursiva em episódios de ensino, definidos por Mortimer (2000) como o conjunto de enunciados criados em sala de aula de Ciências em que são criados contextos para a emergência de significados de um contexto. De acordo com os significados que emergem em diferentes segmentos de um episódio, diferentes zonas de um PC podem ser favorecidas.

Em geral, a análise de episódios de ensino envolve uma ou mais etapas em que as atividades desenvolvidas são descritas e organizadas em razão do conteúdo, ideias abordadas, estratégias utilizadas, entre outras características. Além de contextualizar o que foi trabalhado em sala de aula, a descrição organizada dessas

atividades pode auxiliar a definir e delimitar os momentos em que o conceito a ser analisado foi abordado, definindo assim os episódios de análise de cada aula.

Sepulveda (2010) organizou as atividades desenvolvidas em cada aula que foi observada, destacando os momentos em que ocorreram os temas abordados, as ações de alunos e professores e comentários descritivos gerais. Com isso, pôde definir os episódios de ensino que “tratavam da significação do conceito de adaptação e/ou de modelos explicativos para as mudanças adaptativas, de modo a dar uma ideia de como essa significação ocorreu ao longo de toda a sequência” (Sepulveda, 2010, p. 211).

A análise do discurso com auxílio de um PC pode ser desenvolvida também para além de discurso oral e para episódios de ensino, como para a análise de produções literárias, como LD.

Em geral, a metodologia de coleta de dados e análise de discursos não orais, dentro do Programa de Pesquisa em PC, segue processos e procedimentos em linha com metodologias já consagradas dentro do programa. A interpretação de dados em textos escritos, por exemplo, pode ser guiada pelas zonas do perfil para identificar compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos acerca de um conceito que são utilizados em diferentes contextos. Os objetivos de análises desse tipo podem ser diversos, como inferir formas de se falar acerca de um conceito que são mais recorrentes em um LD e analisar possíveis impactos no ensino (Mortimer *et. al.*, 2014b). Alguns exemplos de trabalhos que utilizaram um PC como ferramenta de análise de textos em LD, com distintos objetivos, são descritos a seguir.

Lima (2019) utilizou a Matriz Semântica de Adaptação como ferramenta para análise do conteúdo semântico acerca desse objeto presente em LD de Biologia aprovados no Plano Nacional do Livro Didático. Para esse fim, traçou correspondências semânticas entre as mensagens codificadas em textos dos LD com os temas e categorias organizados na Matriz.

Coutinho (2005) utilizou do PC de vida para analisar as noções e visões acerca do conceito que são apresentadas em LD de biologia destinados ao Ensino Superior, de modo a explorar que informações os alunos de um curso superior teriam mais acesso e familiaridade.

Já Santos *et. al.* (2020) buscaram, nos LD de Biologia mais utilizados nos anos finais do Ensino Fundamental no estado de São Paulo, por uma contextualização histórica da teoria da evolução a partir de diferentes cientistas. Para isso, utilizaram

do PC de Adaptação para analisar como diferentes trechos desses livros concebiam noções associadas ao tema, a partir dos compromissos ontológicos e epistemológicos. Com isso, inferiram que zonas do PC poderiam ser melhor consolidadas a partir das concepções adotadas, como no trecho:

As noções de genética são mobilizadas para explicar a diversidade dos fósseis, abordagem que, embora imprecisa em termos historiográficos, pode ser facilitadora da aprendizagem de evolução e consolidar a zona variacional do perfil conceitual de adaptação (Santos *et. al.*, 2020, p. 95 e 96).

Em suas considerações, os autores apontam que os LD investigados devem trazer contribuições tais para a consolidação, nos estudantes, das zonas do perfil com concepções contemporâneas, dentro da comunidade científica, sobre adaptação. Porém, apontam também a importância de considerar teorias anteriores e suas contribuições, em uma complementariedade entre elas, trazendo uma contextualização histórica em sua abordagem e sem deslegitimar crenças que estudantes podem trazer de suas vivências.

A contextualização religiosa pode ser importante não só para esclarecer aspectos da constituição histórica do conceito darwinista de adaptação, mas também para tornar os estudantes mais conscientes de seu próprio perfil conceitual, compreendendo os âmbitos de aplicação e validade de cada zona que o compõe (Santos *et. al.*, 2020 p. 100).

Na análise sobre noções de Equação que emergem no Caderno do Professor de Matemática dos anos finais do ensino fundamental, Lozada e D'Ambrosio (2018) buscaram traçar relações sobre como o conteúdo é abordado e as zonas do PC de Equação. A partir dos compromissos epistemológicos e ontológicos identificados ao longo dos textos, os autores apontam quais zonas do PC de estudantes poderiam ser melhor desenvolvidas a partir da concepção adotada. Algumas das considerações que os autores chegaram são mostradas no trecho a seguir:

Há questões do Caderno que favorecem o desenvolvimento da zona de perfil conceitual de equação denominada de pragmática, permitindo ao aluno apresentar uma solução intuitiva, mais voltada para a aritmética. Outras favorecem a zona de perfil conceitual de equação denominada processual, estrutural e aplicacional, na qual procedimentos, propriedades e equacionamento têm ênfase. Por outro lado, há questões que favorecem o desenvolvimento da zona de perfil conceitual geométrica por abordarem situações-problema e exercícios que envolvem conteúdos de Geometria. Portanto, as questões apresentadas no Caderno do Professor acerca do conteúdo de equação quando trabalhadas em sala de aula podem contribuir para desenvolver as cinco zonas de perfil conceitual de equação (Lozada; D'Ambrosio, 2018).

Como observado pelos autores, há questões do Caderno que favorecem o desenvolvimento da zona de perfil conceitual de Equação denominada de pragmática, permitindo ao aluno apresentar uma solução intuitiva, mais voltada para a aritmética. Outras favorecem a zona de perfil conceitual de Equação denominada Processual, Estrutural e Aplicacional, na qual procedimentos, propriedades e equacionamento têm ênfase. Por outro lado, há questões que favorecem o desenvolvimento da zona Geométrica, por abordarem situações-problema e exercícios que envolvem conteúdos de Geometria. Portanto, as questões apresentadas no Caderno do Professor acerca do conteúdo de Equação, quando trabalhadas em sala de aula, podem contribuir para desenvolver as cinco zonas de PC de Equação (Lozada; D'Ambrosio, 2018).

Lima, Serra e El-Hani (2024) analisaram aspectos ontológicos e epistemológicos acerca do conceito de Adaptação em LD de Biologia do Ensino Médio. Para essa análise, buscaram por unidades textuais que poderiam identificar esses aspectos e as codificaram a partir dos temas da Matriz Epistemológica do PC de Adaptação, elaborado por Sepulveda (2010).

Os autores identificaram diferentes concepções que emergiram da análise das unidades textuais e inferiram a frequência que estas surgiam, como mostrado na Figura 2. Dessa frequência, traçaram relações entre os compromissos mais e menos recorrentes com o processo da apresentação e ensino do conceito de adaptação. A maior recorrência de determinados temas, bem como a ausência de outros, é um indício sobre que teorias são consideradas na elaboração dos conteúdos, em quais contextos são aplicadas, se consideram perspectiva histórica do desenvolvimento do conceito, entre outras.

A caracterização enunciativa das zonas de um PC se baseia na eleição de maneiras de expressar o conceito que abranja compromissos característicos dessas zonas. Em geral, pode-se identificar expressões para esse fim no decorrer da própria construção do PC, na resposta de sujeitos a questionários e entrevistas ou na investigação de obstáculos epistemológicos e concepções alternativas no discurso de alunos em salas de aula de Ciências (Sepulveda, 2010; Mortimer *et. al.*, 2014b).

Coutinho (2005) caracterizou formas de falar típicas de cada zona para o PC de Vida pela busca por expressões recorrentes no discurso de alunos ao responderem o questionário elaborado para a proposição de um PC para o conceito.

Após proporem zonas para o PC de Substância a partir de dados advindos da investigação dos domínios sociocultural e ontogenético, Picón, Sevan e Mortimer

(2020, p.1328) utilizaram das informações descritas nessas zonas como “uma estrutura de codificação para analisar maneiras de falar no domínio microgenético”.



Figura 2 - Frequência (%) das categorias da Matriz Semântica do conceito de Adaptação codificadas nas unidades de registro.

Fonte: Lima; Serra; El-Hani (2024), p. 76.

Para reforçar a análise e diminuir influências interpretativas pessoais, os autores optaram pela validação entre pares para cada inferência entre discurso e zonas do PC. Seis outros membros do grupo de pesquisa dos autores analisaram cerca de 70% de todas as transcrições para buscar um consenso na codificação. Lima (2019) também usou da validação por pares para validar as correspondências semânticas das mensagens presentes em LD de Biologia com os temas e as categorias epistemológicas dispostos na Matriz Semântica de adaptação.

A caracterização de um discurso em uma zona do PC deve levar em conta outros aspectos além de expressões típicas de enunciar o conceito. Sepulveda (2010) analisou, para cada zona do PC de adaptação, características de linguagem utilizada para o conceito em diferentes zonas, qual o emprego do termo nestas, entre outras características. No Quadro 1, são mostradas essas características para uma das zonas do PC de Adaptação, denominada *Ajuste Providencial*.

Na perspectiva da aprendizagem, podemos encontrar diferentes possibilidades na utilização de PC como ferramenta de análise. Como exemplo, pode contribuir para análises e discussões acerca da pluralidade e contextualização que podem emergir da aplicação de diferentes estratégias e processos no ensino, como uso de LD em salas de aula de Ciências ou pelo próprio estudante. Também se mostra como potencial ferramenta para analisar visões epistemológicos e ontológicos

predominantes em processos de ensino-aprendizagem, e de que forma essa predominância pode impactar, por exemplo, na constituição ou na superação de obstáculos de aprendizagem. Como exemplo, Jacques (2008) observou tendências, em LD de Ciências dos anos finais do Ensino Fundamental, no uso de concepções características do conceito de Energia, a partir de descritores de zonas típicas de um PC. Para isso, em um primeiro momento a análise semântica de trechos dos livros que abordavam o conceito indicou uma tendência na substancialização da energia. Na literatura de CA consultada, o autor observou que este era um dos fatores de maior recorrência na constituição de obstáculos epistemológicos e ontológicos ao ensino de Energia. Tendo isso em vista, buscou organizar descritores característicos das diferentes zonas de um PC para potencializar avanços no perfil dos próprios estudantes, da zona Realista para Empírica, e desta para a Racional. Tal objetivo foi pensado de forma a oportunizar aos estudantes, de maneira gradual, tomar contato com diferentes significados de Energia e operacionalizar concepções racionalistas na resolução de problemas que exigem noções científicas contemporâneas e relação com outros conceitos.

Quadro 1 - Caracterização enunciativa das zonas de um PC de Adaptação.

Zona		Ajuste Providencial
Linguagem Social		- Linguagem teleológica; - Análise funcional de natureza etiológica;
Formas Típicas de Enunciados	Estrutura composicional	- A estrutura x, ou a morfologia x - Dessa estrutura, capacita o organismo y, ou grupo w de organismos y, a desempenhar a atividade vital z e/ou a cumprir seu papel na economia natural
	Tema	- Harmonia entre propriedades dos organismos e condições ambientais. - Exaltação a complexidade da forma viva e ajuste da estrutura dos organismos a função.
	Estilo (termos recorrentes)	“Está adaptado; é adaptado, têm adaptações; tem capacidade de adaptação”. “são para”; “é próprio para”; “serve para”; “serve de”; “é apropriado para”; “feito para”.
	Uso do termo 'adaptação'	- Designa propriedade ou estado de ser de uma estrutura. - É a explicação para a existência de tal estrutura.

Fonte: adaptado de Sepulveda (2010, p. 339).

Nesta seção, pudemos abordar sucintamente algumas possíveis utilização do PC como ferramenta de análise e planejamento. Na literatura de pesquisas em PC, encontramos exemplos do uso de PC no planejamento de intervenções de ensino-aprendizagem, análise de discurso em sala de aula, textos de LD *etc.* Observa-se também alguns métodos aplicados na análise de episódios de ensino-aprendizagem que se estabeleceram historicamente como um modelo a ser desenvolvido dentro do programa. Para a presente pesquisa, destaca-se em especial as metodologias de análise das zonas de um PC em entrevistas e questionários (Mortimer, 2002; Coutinho, 2005) e textos de LD de Ciências (Coutinho, 2005).

1.7 Considerações do capítulo

Neste primeiro capítulo, foram apresentadas algumas características do PE de Bachelard (1979) que inspiraram a origem do PC de Mortimer, e como essas características foram se modificando e novas surgindo com a evolução dessa teoria e de pesquisas na área. Atualmente, podemos conceber o PC como uma teoria com pressupostos teóricos e metodológicos muito consistentes e fundamentados, que podem contribuir para que o desenvolvimento de pesquisas acerca das formas de se pensar um conceito se dê de maneira satisfatória.

Pesquisas com base nesses pressupostos devem investigar de maneira extensiva o conceito em seus diferentes domínios genéticos e garantir que o próprio conceito estudado seja de relevância para a área, dentre outras contribuições possíveis.

Nos próximos capítulos, é abordado como Baltieri (2020) utilizou dos pressupostos mais atuais da teoria do PC para propor a construção de um PC para um conceito central e de grande relevância no ensino de Química: a ligação covalente (LC). Além da proposta apresentada, exploramos algumas potencialidades desse PC como ferramenta de análise de discurso em textos em LD, a partir dos pressupostos teóricos e metodológicos descritos nesse capítulo.

2 O PERFIL CONCEITUAL DA LIGAÇÃO COVALENTE

Seguindo algumas das orientações descritas no Capítulo 1 para proposição de um PC, Baltieri (2020) propôs um perfil para o conceito de **LC**.

Para justificar a elaboração do perfil, o autor aponta que o conceito de LC é de grande relevância no estudo da Química, sendo central para o entendimento e desenvolvimento de diversos outros conceitos da área, como: formação de substâncias, compostos moleculares, polaridade, geometria molecular, entre outros. A polissemia pode ser verificada nas diferentes teorias que explicam a ligação química, como ligação por compartilhamento de elétrons, sobreposição de orbitais atômicos, formação de orbital deslocalizado pela molécula *etc* (IUPAC, 2014). Em movimentos como a antropomorfização do compartilhamento de elétrons, encontramos o conceito de LC, oriundo da linguagem científica, na linguagem cotidiana, como mostrado na Figura 3.



Figura 3 - Exemplos de aplicação do conceito de Ligação Covalente na linguagem cotidiana.

Fonte: Montagem a partir de imagens coletadas no site Pinterest³ e na página do Facebook Ciência em Memes⁴.

³ Disponível em: <https://br.pinterest.com/pin/638244578428552502/>. Acesso em 12 dez. 2021.

⁴ Disponível em: <https://www.facebook.com/cienciaemmemes/photos/a.918883825273285/962823760879291/>. Acesso em 12 dez. 2021.

Baltieri (2020, p. 22) aponta também existir “certa tradição em abordar de maneira linear e somativa os diferentes modelos sobre ligação covalente”, durante o ensino do conceito. Como resultado, tal tradição pode levar a obstáculos ao processo de ensino-aprendizagem e à compreensão das particularidades dos diferentes significados atribuídos ao conceito.

Com a relevância do conceito identificada e apontadas algumas características que justificam a construção de um PC para o conceito de LC, Baltieri (2020) buscou, então, identificar os compromissos epistemológicos e ontológicos por meio de revisão da literatura.

Para a obtenção dos temas epistemológicos, Baltieri (2020) utilizou como estratégia de investigação a revisão narrativa de documentos secundários que abordassem o desenvolvimento histórico do conceito de ligação química e LC. Os temas epistemológicos identificados foram: animismo, realismo, empirismo, essencialismo, realismo prático, racionalismo moderno e contemporâneo.

Após definidas as características principais dos temas a partir de concepções identificadas na literatura, Baltieri (2020) realizou uma revisão sistemática sobre CA do conceito de ligação química e covalente. Nessa etapa, buscou dialogar com os temas epistemológicos identificados na revisão histórica, de modo a caracterizar o domínio ontogenético.

O Quadro 2 mostra algumas das principais características atribuídas ao conceito de ligação química e LC identificadas por Baltieri (2020) em sua investigação dos temas epistemológicos e CA pela revisão da literatura.

Para o tema Animismo, a ligação é entendida como modelo para afinidade entre compostos: os compostos “querem” se conectar com outros afins. Como principal CA em alunos, foi identificada a associação de ligação química/covalente com o **desejo**, a vontade de um átomo se ligar, buscando estabilidade ou formar novo composto.

No tema realismo, a ligação é tida como algo secundário, decorrente de propriedades das substâncias, e não explicada em si, sendo colocada como evento isolado e sem uma definição de sua natureza. Nas CA neste tema, foi possível identificar diferentes maneiras de tentar conceituar ligação química relacionando com outros conceitos, como explicar a ligação química pelos tipos de átomos que a forma. Também foram identificadas tentativas de conceituar por definições não muito claras, como uma “força de atração”, novamente sem discorrer sobre a natureza específica

da ligação, e conceituações embasadas em apenas classificar os tipos de ligações (iônica e covalente, por exemplo) ou como um algo concreto (materialização).

Quadro 2 -Temas epistemológicos identificados para a Ligação Covalente

Tema	Características atribuídas a ligação química e covalente
Animismo	Afinidade entre substâncias; “Vontade” de átomos se unirem
Realismo	Ligação química como dependente de outros conceitos e características, sem definir a natureza de seu conceito
	Atribuem um conceito pouco definido, pouco informando sobre sua natureza
	Classificação de ligações, sem informar sobre o conceito em si
	Materialização da ligação
Empirismo	Associam ligação química com propriedades obtidas experimentalmente
Essencialismo	Ligação covalente essencialmente como um par de elétrons
Racionalismo Clássico	Conceituação de ligação a partir de uma rede de outros conceitos, como compartilhamento de elétrons e tipos de átomos que se ligam Ligação entendida como abstração, e não mais como material
Racionalismo Moderno	Descreve ligação covalente a partir de características mecânico-quânticas
Racionalismo Contemporâneo	Distribuição dos elétrons em orbitais deslocalizados (TOM) Nuvem eletrônica (DFT)

Fonte: elaborado pelo próprio autor, adaptado de Baltieri (2020).

No tema do Empirismo, o conceito de ligação química passa a ter relação com medidas experimentais, rompendo com a ideia realista de algo que acontece simplesmente, para ter relações matemáticas que a descrevem, em uma primeira forma de se analisar a ligação química em si. Como principais CA identificadas, observa-se a atribuição de propriedades experimentais para explicar a ligação, como distância entre átomos, forma de armazenar energia, entre outras.

Já para o tema Essencialista, a valência de um átomo passa a ser vista no campo microscópico, relacionada com a combinação de elétrons. Nesse ponto da histórica do desenvolvimento da ligação química que, pela primeira vez, surge a ideia de LC, como compartilhamento de pares eletrônicos, tida como característica essencial para uma ligação.

A expansão da teoria que rege a temática essencialista (Teoria de Lewis), pela relação com uma rede de conceitos, como o modelo de Repulsão dos Pares Eletrônicos na Camada de Valência (VSEPR, do inglês⁵), que explica a geometria de compostos, dá origem ao tema epistemológico do racionalismo clássico. Apesar de usar, pela primeira vez, de uma rede de conceitos para explicar a ligação, foram identificadas CA em que a descrição de ligação covalente se dá apenas em função dos elétrons ou apenas das propriedades dos átomos que se ligam, por exemplo. Em algumas concepções, observa-se a extensão da ideia de compartilhamento de elétrons para explicar ligações químicas que não são covalentes, como a iônica.

O tema Racionalismo Moderno deriva de contribuições das descrições mecânico-quânticas para a conceituação de LC, sobretudo da Teoria da Ligação de Valência (TLV). Como exemplos, temos: contribuições energéticas (ressonância) para explicar combinações entre núcleos atômicos, utilizando da função de onda para seu cálculo; e a associação da LC a uma probabilidade, a partir da combinação das funções de onda que descrevem os orbitais atômicos sobrepostos. Entre as CA observadas para esse tema, tem-se a ideia de hibridização como um processo que ocorre, e não um método matemático, além de materialização dos orbitais como entes concretos.

Por fim, para o tema Racionalismo Contemporâneo, entende-se o desenvolvimento do conceito de LC que ainda se encontra em desenvolvimento, com a Ciência não se limitando mais apenas à realidade conhecida. Nesse tema epistemológico, encontra-se a relação de LC com a distribuição dos elétrons dos átomos que fazem parte da ligação, em orbitais deslocalizados, explicada pela Teoria do Orbital Molecular (TOM). A Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês⁶) também apresenta relações entre a ligação e deslocalização de elétrons, com a inclusão da ideia de nuvem eletrônica. Como CA, se observa uso de materialização para nuvem eletrônica e orbitais, e interpretação da nuvem eletrônica pela natureza de uma partícula, e não em função da densidade da carga, como ocorre na DFT.

Com os compromissos epistemológicos e CA atribuídos aos domínios genéticos sociocultural e ontogênico, pode-se identificar e descrever os temas

⁵ Valence Shell Electronic Pair Repulsion.

⁶ Density functional theory.

epistemológicos para o conceito de LC e quais as principais CA de alunos ao abordar o conceito em um desses temas.

Para a análise do domínio microgenético, Baltieri (2020) propôs um questionário, elaborado a partir das informações obtidas nas etapas de revisão narrativa e da literatura, a fim de verificar e analisar se existe relação entre as visões apresentadas nas etapas anteriores e as concepções dos alunos em um microprocesso. O questionário foi composto por dez questões abertas, a serem respondidas por alunos de um curso de Bacharelado em Química. Foi possível identificar, na análise das respostas, respaldo aos significados encontrados durante a revisão narrativa.

Com os resultados encontrados nas revisões narrativa e sistemática e obtidos pelos questionários, Baltieri (2020) construiu a matriz semântica de significação para o conceito de LC. A matriz apresenta, para cada tema epistemológico, uma ou mais categorias, que representam, cada, uma visão ontológica distinta dentro do mesmo tema. O Quadro 3 mostra as categorias propostas e os compromissos epistemológicos e ontológicos identificados para cada uma.

Quadro 3 - Matriz semântica de significação do conceito de ligação covalente.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
Animista	Antropomorfismo	A ligação covalente está relacionada a uma característica humana, resultado de átomos, substâncias, moléculas <i>etc.</i> que gostam de se ligar.
Realismo	Dependência Incoerente	A ligação covalente é definida a partir de um conceito que tem pouca ou nenhuma relação direta com ela, como metais, ametais, íons <i>etc.</i>
	Força	A ligação covalente é uma força (indefinida) que une átomos, substâncias, íons <i>etc.</i>
	Tipificação	A ligação covalente é um tipo de ligação química.
	Materialidade realista	A ligação covalente é um ente concreto que pode sofrer mudanças semelhantes ao objeto macroscópico.
	Isolamento	A ligação covalente se forma em átomos isolados, sem nenhuma influência externa.
	Inexistência	A ligação covalente está ausente. Não há qualquer preocupação em pensar sobre a conectividade entre átomos, substâncias <i>etc.</i>

Empirismo	Energética	A ligação covalente é uma forma de armazenamento de energia e pode tanto absorver, quanto liberar energia.
	Valência	A ligação covalente é uma propriedade obtida empiricamente, através da valência e corresponde a um número.
Essencialismo	Par de elétrons	A ligação covalente possui uma característica essencial de ser composta de um par de elétrons.
Racionalismo Clássico	Identidade	A ligação covalente é tida como a única ligação possível entre átomos. Os demais "tipos de ligação" (<i>i.e.</i> , metálica e iônica) possuem como uma das etapas de sua formação, o estabelecimento de ligação covalente entre os átomos.
	Propriedade do elétron	A ligação covalente é uma propriedade dos elétrons, os quais podem estabelecer algum tipo de conexão entre si.
	Propriedade do átomo	A ligação covalente é propriedade dos átomos que se ligam e regulam as propriedades apresentadas por ela.
Racionalismo Moderno	Sistema complexo	A ligação covalente é um sistema complexo, assim chamado por não se limitar apenas aos elétrons ou apenas aos núcleos atômicos, mas sim por considerar a ligação como um resultado da atração de todos os elétrons por todos os núcleos envolvidos.
	Orbitais localizados	A ligação covalente é resultado da sobreposição de orbitais localizados e direcionados.
	Processos	A ligação covalente é um processo chamado de hibridização e que envolve várias etapas para chegar num sistema de ligações mais favoráveis.
Racionalismo Contemporâneo	Orbitais deslocalizados	A ligação covalente é o resultado da formação de um orbital deslocalizado pela molécula.
	Materialidade ilustrativa	A ligação covalente, a partir do orbital deslocalizado, é uma forma idêntica à sua representação gráfica
	Ordem de ligação	A ligação covalente é o resultado de um sistema que possui mais orbitais que estabilizam a molécula do que orbitais que desestabilizam.

Fonte: Baltieri (2020, p. 97 e 98).

Com os compromissos identificados para cada categoria de cada tema epistemológico, explicitados na matriz semântica, Baltieri (2020) pode, então, propor

o PC para o conceito de LC, com cada zona do perfil sendo construída de modo a ser distinta epistemológica e ontologicamente de qualquer outra zona. A partir dos temas epistemológicos e suas características, descritas no Quadro 3, foram construídas quatro zonas para o perfil: conectividade indiscriminada, atratividade estabilizadora, remanescência localizada e deslocalização sistemática.

A primeira zona (Conectividade Indiscriminada) é composta pelas categorias mostradas no Quadro 4. Em todas essas categorias, o processo de significação do conceito de LC pouco ou nada diz sobre a natureza etiológica do próprio conceito, se centrando em fazer associações com outros conceitos, como exemplificando a partir de relações entre átomos, em termos de energia ou valência.

Quadro 4 - Caracterização da primeira zona, Conectividade Indiscriminada.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
Animista	Antropomorfismo	A ligação está relacionada a uma característica humana, resultado de átomos, substâncias, moléculas <i>etc.</i> que gostam de se ligar.
Realismo	Dependência incoerente	A ligação covalente é definida a partir de uma relação com pouca ou nenhuma relação entre os conceitos, como metais, ametais, íons, moléculas.
	Inexistência	A ligação covalente está ausente. Não há qualquer preocupação em pensa
	Tipificação	A ligação covalente é um tipo de ligação química.
Empirismo	Energética	A ligação covalente é uma forma de armazenamento de energia e pode tanto absorver, quanto liberar energia.
	Valência	A ligação covalente é uma propriedade obtida empiricamente, através da valência e corresponde a um número.
Racionalismo clássico	Identidade	A ligação covalente é tida como a única ligação possível entre átomos. Os demais "tipos de ligação" (<i>i.e.</i> , metálica e iônica) possuem como uma das etapas de sua formação, o estabelecimento de ligação covalente entre os átomos.

Fonte: Baltieri (2020, p. 102).

A segunda zona, denominada Atratividade Estabilizadora, reúne as categorias mostradas no Quadro 5. Nesta zona, os compromissos epistemológicos e ontológicos

identificados relacionam o conceito de LC sendo formada por efeitos atrativos, entre átomos ou elétrons, por exemplo, que buscam prover estabilidade a um sistema.

Quadro 5 - Caracterização da segunda zona, Atratividade Estabilizadora.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
Realismo	Força	A ligação covalente é uma força (indefinida) que une átomos, substâncias, íons <i>etc.</i>
	Materialidade realista	A ligação covalente é um ente concreto que pode sofrer mudanças semelhantes ao objeto macroscópico.
	Isolamento	A ligação covalente se forma em átomos isolados, sem nenhuma influência externa.
Essencialismo	Par de elétrons	A ligação covalente é um par de elétrons.
Racionalismo clássico	Propriedade do elétron	A ligação covalente é uma propriedade dos elétrons, os quais podem estabelecer algum tipo de conexão entre si.
	Propriedade do átomo	A ligação covalente é propriedade dos átomos que se ligam e regulam as propriedades apresentadas por ela.

Fonte: Baltieri (2020, p. 103).

Já a terceira zona, denominada de Remanescência Localizada, é formada pelas categorias indicadas no Quadro 6. Nos compromissos epistemológicos e ontológicos identificados nessa zona, destaca-se a consideração das relações de atração e repulsão e de estabilização e desestabilização na formação de ligações covalentes. Também reflete nessas concepções a direcionalidade e localidade das ligações.

Por fim, a quarta zona, cujas categorias e compromissos epistemológicos e ontológicos se encontram no Quadro 7, é denominada Deslocalização Sistemática. Tal designação se deu tendo em vista a concepção da formação de orbitais deslocalizados, resultante das “teorias que buscaram analisar o sistema em sua estrutura eletrônica geral, não apenas a ligação, isoladamente” (Baltieri, 2020, p. 105).

Quadro 6 - Caracterização da terceira zona, Remanescência Localizada.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
Racionalismo moderno	Sistema complexo	A ligação covalente é um processo que envolve um sistema complexo, assim chamado por não se limitar apenas aos elétrons ou apenas aos núcleos atômicos, mas sim por considerar como um resultado

		da atração de todos os elétrons por todos os núcleos envolvidos.
	Orbitais localizados	A ligação covalente é resultado da sobreposição de orbitais localizados e direcionados.
	Processo	A ligação covalente é um processo chamado de hibridização e que envolve várias etapas para chegar num sistema de ligações mais favoráveis.
Racionalismo contemporâneo	Ordem de ligação	A ligação covalente é o resultado de um sistema que possui mais orbitais que estabilizam a molécula do que orbitais que desestabilizam.

Fonte: Baltieri (2020, p. 104).

Quadro 7 - Caracterização da quarta zona, Deslocalização Sistemática.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
Racionalismo contemporâneo	Orbitais deslocalizados	A ligação covalente é o resultado da formação de um orbital deslocalizado pela molécula.
	Materialidade e ilustrativa	A ligação covalente, a partir do orbital deslocalizado, é uma forma idêntica à sua representação gráfica.

Fonte: Baltieri (2020, p. 105).

Com o PC para o conceito de LC, proposto por Baltieri (2020), é possível vislumbrar notáveis potencialidades de sua aplicação em processos de ensino-aprendizagem em Ciências. O PC sugerido pode ser uma interessante ferramenta para se planejar esses processos levando em conta a heterogeneidade de modos de pensar e formas de falar que existe acerca do conceito de LC, priorizando um ensino que forneça ferramentas para o aprendiz entender contextos adequados para o uso das diferentes concepções de LC. O PC também apresenta possíveis CA dos estudantes que podem auxiliar o professor na preparação das aulas e atividades, e coloca em posição de destaque os papéis da linguagem científica e da história do desenvolvimento científico do conceito no processo de ensino-aprendizagem.

No entanto, Baltieri (2020) aponta que o baixo número de respondentes (quatro alunos) ao questionário, que proveu as informações para análise do domínio microgenético, pode levar a uma conclusão precipitada sobre os resultados. Com isso, o próprio autor recomenda que seria interessante uma análise mais extensiva desse

domínio, para uma comparação mais fidedigna e consistente de seus resultados com os compromissos epistemológicos e ontológicos identificados.

A presente pesquisa buscou, em um primeiro momento, refinar o domínio microgenético para o PC de LC proposto por Baltieri (2020), a partir da reaplicação do questionário proposto a um maior número de estudantes, de cursos de bacharelado e Licenciatura em Química. Dessa nova investigação, triangulou-se os dados oriundos das diferentes fontes e estabelecer as zonas a partir dos compromissos epistemológicos e ontológicos que emergiram na exploração dos diferentes domínios.

Em um segundo momento, com o estabelecimento do PC a partir das novas articulações possibilitadas da investigação mais extensiva do domínio microgenético, passa-se para um segundo objetivo da atual pesquisa: identificar e analisar concepções de LC em LD utilizados em cursos superiores de Química. Na etapa de identificação, focou-se em levantar quais concepções principais emergiam ao longo dos textos, como dialogam com as zonas que constituem o PC da LC e em quais contextos de aplicação diferentes concepções são utilizadas. Já a análise dos trechos e contextos em que as diferentes concepções de LC são utilizados se deu de maneira a inferir acerca da validade e adequação entre a concepção escolhida, a rede de conceitos utilizada em conjunto e o objetivo que esses trechos buscam explicar. Com isso, foi possível, também, trazer possíveis impactos ao processo de ensino-aprendizagem do conceito da LC por estudantes que tomam contato com esses LD. As metodologias de coleta e análise de dados, os resultados e discussão dessas etapas são discutidos nos capítulos 4 e 5.

3 CONCEPÇÕES E CARACTERÍSTICAS DA LIGAÇÃO QUÍMICA E COVALENTE NOS MODELOS CLÁSSICO E QUÂNTICO

Na perspectiva sociointeracionista da aprendizagem, a qual a teoria do PC se insere, a aprendizagem de Ciências por um aluno está ancorada na aprendizagem da linguagem social da Ciência Escolar (El-Hani *et. al.*, 2014). Conceitos científicos são altamente abstratos e se relacionam com objetos, situações e eventos por meio da linguagem científica, muitas vezes se afastando de experiências concretas que o aluno possua. Além disso, a depender da complexidade exigida para se aplicar um conceito ou para explicá-lo, é comum necessitar usar de um sistema hierárquico entre outros conceitos e suas relações (Vygotsky, 2001).

O conceito de LC mostra-se como um conceito que exige um alto grau de abstração para ser explicado dentro das teorias contemporâneas, mantendo relações com diversos outros conceitos abstratos (Baltieri; Bego; Cebim; 2021; IUPAC, 2014).

Nessa rede de conceitos, encontram-se características relacionadas aos modelos Clássico da ligação química e LC, sobretudo proposta por Lewis (1916) e expandida por Langmuir (1919), e também Quântico, como a TLV (Pauling, 1960) e a TOM (Mulliken, 1970).

Em investigação acerca da concepção de LC por licenciandos em Química, Fernandes (2019) observou que o sistema de conceitos que utilizavam se mostrava limitado a poucos conceitos, sobretudo: compartilhamento de elétrons, sobreposição de orbitais e estabilidade. Isto resulta no estabelecimento de poucas relações entre conceitos, o que dificulta aplicações e seu entendimento, visto sua complexidade. Outros problemas podem ser apontados na investigação, como a falta de distinção entre uso de características dos modelos clássicos e quânticos e, dentre os poucos conceitos utilizados pelos licenciandos, o aparecimento de concepções alternativas à Ciência.

Para a aprendizagem de LC, seja em sala de aula, seja por meio da leitura de textos, como em LD, é desejável que o aprendiz tome contato e seja capaz de relacionar diferentes conceitos, presentes nas diferentes teorias e modelos para ligação química e covalente. Neste capítulo, discutimos alguns desses principais conceitos e suas relações com ligação química e LC dentro dos modelos Clássico e Quânticos. Com isto, buscamos explorar uma rede de conceitos e relações conceituais acerca da LC, bem como explicitar possíveis distinções entre esses

conceitos para os diferentes modelos e teorias principais abordados em salas de aula de Ciências.

3.1 O Modelo Clássico da Ligação Covalente: ideias acerca do compartilhamento de elétrons

Em nossa discussão, abordamos dentro do Modelo Clássico as ideias que concebem a LC como o compartilhamento de elétrons entre átomos.

A revolução na teoria da ligação química que levou ao Modelo Clássico se deu, sobretudo, com a descoberta da existência do elétron por J.J. Thomson, em 1897. Anteriormente a isto, as principais teorias da ligação química estavam associadas com transferência e atração entre cargas elétricas, com pouca discussão e atribuições de significados submicroscópicos à ligação química, que era associada simplesmente à **valência**, a um número de ligações que um átomo poderia conceber (Baltieri, 2020; Fernandes, 2019).

Com a descoberta do elétron, passaram a ser propostas teorias eletrostáticas da valência dos elementos, baseados nas propriedades do elétron. Destacamos aqui a teoria atômica proposta por Lewis (1916), em que explica diferenças entre moléculas polares e apolares com base na força que mantém os elétrons atraídos pelos núcleos dos átomos.

Lewis (1916) propõe um modelo atômico em que o átomo poderia ser representado por um cubo, com o núcleo no centro do cubo e os elétrons de valência distribuídos nos oito vértices, como mostrado na Figura 4.

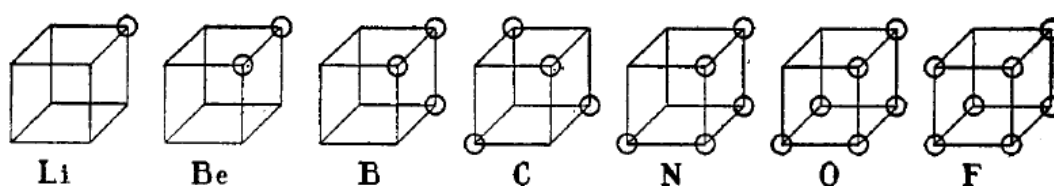


Figura 4 – Estruturas atômicas dos átomos Li, Be, B, C, N, O e F, pelo modelo do átomo cúbico de Lewis.

Fonte: Lewis (1916, p. 767).

Em seus postulados acerca do modelo do átomo cúbico, Lewis (1916) aponta que átomos com oito elétrons na camada de valência são extremamente estáveis, e que para os demais átomos, quanto mais próximo do valor de oito elétrons nessa camada, maior a estabilidade.

Acerca da combinação de elementos químicos, as teorias anteriores em geral assumiam a ideia proposta por Helmholtz de que um elétron era transferido completamente de um átomo para outro. Tal hipótese se mostrou satisfatória para compostos polares, porém Thomson já havia mostrado que isso não ocorria na combinação de átomos em compostos ditos apolares, em que um mesmo elétron poderia pertencer a dois átomos simultaneamente. Lewis (1916) aprofunda essa discussão colocando que não existem apenas substâncias estritamente polares ou apolares, mas diferentes níveis. Para a molécula de iodo molecular (I_2), por exemplo, Lewis aponta três formas diferentes, como mostrado na Figura 5.

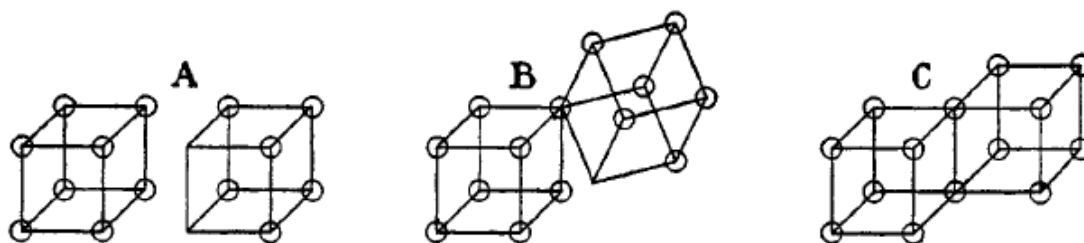


Figura 5 – Diferentes representações propostas por Lewis da estrutura da molécula de iodo.

Fonte: Lewis (1916, p. 775).

A forma A da Figura 5 mostra o I_2 completamente ionizado, com a transferência de um elétron da camada de valência de um dos átomos de iodo para o outro átomo. Para a forma B, um dos elétrons de valência de um dos átomos de iodo se “encaixa” na camada de valência do segundo. Já na forma C, um elétron do átomo que já está com sua camada de valência com oito elétrons se “encaixa” na camada do outro átomo, passando assim a ambos terem oito elétrons em sua última camada e um mesmo par de elétrons pertencendo, simultaneamente, a dois átomos diferentes. Essa forma C trata da forma predominante e característica para a molécula de I_2 , assim como para demais compostos de halogênios (Lewis, 1916).

Em uma substância como o iodo líquido, não se deve assumir que todas as moléculas estão no mesmo estado, mas sim que alguns são altamente polares, alguns quase apolares e outros representam todas as gradações entre os dois. Quando encontramos esse iodo em diferentes ambientes encontramos diferentes graus de polaridade, significando apenas que em um meio há uma porcentagem maior das formas mais polares. Então o bromo, embora representado por uma fórmula inteiramente semelhante, é menos polar do que o iodo. Em outras palavras, na molécula média a separação de carga é menor do que no caso de iodo. O cloro e o flúor são ainda menos polares do que qualquer um e podem ser considerados como compostos

quase completamente por moléculas da forma C (Lewis, 1916, p.776, tradução nossa⁷).

Nesse trecho, podemos destacar a hipótese de Lewis (1916) de que as ligações entre dois elementos não variam em tipo, mas sim em grau de polaridade, com uma transição contínua entre extremos do tipo de ligação química: a covalente, como dois centros compartilhando dois elétrons, e a iônica, em que ocorre atração entre íons de cargas opostas.

A teoria de Lewis é expandida por Langmuir (1919) para elementos químicos mais complexos, bem como propõe a ligação química em compatibilidade com os modelos atômicos de Bohr e Sommerfeld, em que os elétrons estão distribuídos em camadas concêntricas esféricas em torno do núcleo. Essa aproximação com o átomo de Bohr, muito aceito na comunidade científica dos físicos, e a expansão da aplicação para elementos químicos mais pesados, contribuíram na popularização da ideia de ligação química como dois centros compartilhando dois elétrons (Souza, 2020).

Adotamos as ideias apontadas da teoria de Lewis (1916) e dos postulados de Langmuir (1919) como componentes do Modelo Clássico para a ligação química. Nesse modelo, a LC passa a ganhar o significado de **compartilhamento** de elétrons entre os átomos, diferenciada em natureza da ligação iônica, em que átomos podem “ganhar” ou “perder” elétrons e a ligação se dá por atração entre cargas opostas. As ligações duplas ou triplas são explicadas como dois centros compartilhando dois ou três pares de elétrons.

Os princípios do Modelo Clássico para a ligação química foram fundamentais no desenvolvimento das principais teorias quânticas abordadas na próxima seção. Ainda, a ideia da LC como compartilhamento de um par de elétrons entre dois átomos ainda é uma das mais exploradas por professores, em processos de ensino-aprendizagem, e abordada em LD (Fernandes, 2019), o que denota a importância do Modelo Clássico na constituição das concepções acerca de ligação química e LC.

⁷ In a substance like liquid iodine it must not be assumed that all of the molecules are in the same state, but rather that some are highly polar, some almost nonpolar, and others represent all gradations between the two. When we find that iodine in different environments shows different degrees of polarity, it means merely that in one medium there is a larger percentage of the more polar forms. So bromine, although represented by an entirely similar formula, is less polar than iodine. In other words, in the average molecule the separation of the charge is less than in the case of iodine. Chlorine and fluorine are less polar than either and can be regarded as composed almost completely of molecules of the form C.

3.2 O Modelo Quântico da Ligação Química

Algumas das principais características e ideias das teorias que abarcam o Modelo Clássico da ligação química passaram por uma nova interpretação nas décadas que se seguiram, destacando-se a incorporação das **teorias quânticas** para o entendimento da ligação e descrição de um sistema molecular.

No final do século XIX, a descoberta do elétron deu margem para novas interpretações acerca da ligação química que levou ao desenvolvimento do Modelo Clássico. Para o Modelo Quântico, podemos destacar o desenvolvimento do Princípio de Exclusão de Pauli e a descoberta acerca do *spin* do elétron, ambas de 1925, como marcos da incorporação do compartilhamento de elétrons à teoria quântica (Baltieri, 2020; Fernandes, 2019; Pauling, 1960).

No Modelo Quântico para a ligação química, podemos destacar duas teorias que, muitas vezes vistas como concorrentes na descrição de sistemas moleculares ao longo de boa parte do século XX, atualmente são amplamente divulgadas e utilizadas em sala de aula de Ciências: a TLV e a TOM (Baltieri, 2020; Fernandes, 2019; Hunter; Rodriguez; Becker, 2022).

3.2.1 Contribuições da TLV para a investigação da natureza da ligação química

A TLV tem algumas de suas bases constituídas a partir da descrição do hidrogênio molecular (H_2) por Heitler e London, em 1927, com a aplicação da Equação de Schrödinger para cálculo da função de onda do sistema molecular, formado pelos átomos individuais de hidrogênio. Posteriormente, Slater e, principalmente, Linus Pauling trouxeram contribuições para a descrição de moléculas como o H_2 e mais complexas dentro da TLV (Baltieri, 2020; Fernandes, 2019; Pauling, 1960).

Na TLV, ganha grande destaque a questão da ligação química como sinônimo de **estabilidade** de um grupo de átomos. Pauling (1960) coloca que a ligação química entre dois ou mais átomos passa a ser considerada quando as forças que atuam entre eles levam a formação de um sistema com estabilidade suficiente para ser considerado uma molécula independente.

No tratamento mecânico quântico de um sistema molecular, o principal interesse está na determinação do **estado normal** do sistema, no qual a energia total do sistema possui um valor mínimo, o que indica sua máxima estabilidade (Pauling, 1960).

As coordenadas do sistema são representadas por uma função de onda (ψ), que pode ser obtida pela combinação linear de funções de ondas das diferentes estruturas possíveis do sistema. A energia total do sistema no estado normal deve ser menor do que a energia para qualquer estrutura proposta, o que leva à possibilidade de a melhor função de onda para o sistema ser formada, em partes, por funções de onda de estruturas diferentes. Para casos assim, em que o estado normal é descrito envolvendo duas ou mais estruturas, o sistema é um **híbrido de ressonância** entre as estruturas envolvidas. O conceito de ressonância vem da mecânica quântica e é um princípio de grande importância na TLV, como apontado por Pauling (1960, p. 13, tradução nossa):⁸

Verifica-se que existem muitas substâncias cujas propriedades não podem ser explicadas por meio de uma única estrutura eletrônica do tipo ligação-valência, mas que podem ser assentadas no esquema da teoria de valência clássica pela consideração da ressonância entre duas ou mais dessas estruturas.

Na investigação da natureza da ligação covalente, os elétrons são descritos por funções de onda (ψ) ou **orbitais**, obtidos pela resolução da equação de Schrödinger para cada elétron, e com o quadrado da função de onda (ψ^2) informando a probabilidade de o elétron ser encontrado em certa distância do núcleo (Pauling, 1960).

A ligação covalente é formada da sobreposição de orbitais atômicos de dois átomos em um sistema molecular, que se dá na região internuclear, de modo que os elétrons ainda são parte dos átomos que se ligam e a ligação covalente é **direcionada**. A sobreposição dos orbitais atômicos “significa a extensão das regiões do espaço na qual as funções de onda dos dois orbitais possuem valores elevados coincidentes” (Pauling, 1960, p.108, tradução nossa).⁹

A energia total do sistema atinge um valor mínimo, o que indica um máximo de estabilidade, na configuração em que a distância entre os átomos ligantes é igual a distância internuclear de equilíbrio, com as energias atrativas superando as repulsivas e estabilizando o sistema. A energia total do sistema aumenta com a aproximação dos

⁸ It is found that there are many substances whose properties cannot be accounted by means of a single electronic structure of the valence-bond type, but which can be fitted into the scheme of classical valence theory by the consideration of resonance among two or more such structures.

⁹ Signifying the extent to which the regions in space in which the two orbital wave functions have large values coincide.

átomos, devido às repulsões, e para explicar a existência de moléculas como o H_2 podemos considerar a ressonância do elétron entre os orbitais dos átomos que se ligam. Isto porque o fenômeno da ressonância explica a diminuição da energia de interação entre os átomos, o que possibilita a atração entre os mesmos no comprimento mínimo de energia (Pauling, 1960).

Com isto, temos que a energia de formação de uma ligação covalente é majoritariamente a energia de ressonância de dois elétrons entre os dois átomos, e esta cresce com a superposição dos orbitais atômicos na formação da ligação.

A sobreposição de orbitais atômicos pode, assim, ser interpretada como a medida da interpenetração das distribuições da ligação de elétrons dos dois átomos, sendo esperado que, de dois orbitais atômicos, aquele que consegue se sobrepor mais com o orbital do outro átomo forma a ligação mais forte, que será direcionada ao longo desse orbital (Pauling, 1960).

Entre outras contribuições da TLV para explicar a estabilidade de um sistema molecular, destacamos a questão do emparelhamento de *spin* dos elétrons. O estado molecular em que os elétrons envolvidos em uma ligação covalente apresentam *spin* antiparalelos é mais estável do que o estado em que estes são paralelos entre si. Com isso, a formação de uma ligação covalente deve ocorrer entre átomos com *spin* opostos, de modo a estabilizar o sistema (Pauling, 1960).

Na TLV, explica-se o fenômeno de mudança de configuração eletrônica de alguns átomos quando em ligação, como o caso do carbono no metano, que possui quatro ligações covalentes equivalentes e adota uma geometria tetraédrica. Essa característica das ligações no C já era observada, sobretudo na área da química orgânica, e na TLV é explicada pelo fenômeno da **hibridização** dos orbitais atômicos do carbono, com a formação de um orbital híbrido sp^3 . A formação de um orbital híbrido envolve a combinação linear das funções de onda dos orbitais atômicos, e é possível quando o novo orbital possui energia de ligação mais forte, ou seja, se sobrepõe melhor ao orbital do outro átomo ao que se liga, do que os orbitais atômicos sozinhos. Com isso, a liberação de energia observada na formação das quatro ligações covalentes do carbono em moléculas tetraédricas, como a molécula de metano CH_4 , compensa a energia gasta na mudança da configuração eletrônica.

Pauling (1960) também aponta a possibilidade de formação de ligações múltiplas no átomo de carbono (C) pelo fenômeno da hibridização. Em moléculas em que o carbono se encontra hibridizado na forma sp^2 , em que possui três orbitais

híbridos e um orbital p puro, os orbitais híbridos formam três ligações do tipo *sigma* (σ), com ângulo de 120° entre si, e o orbital p , que possui forma de haltere, se superpõe abaixo e acima do plano que contém as ligações σ . Essa superposição lateral resulta na formação de uma ligação mais fraca, denominada *pi* (π), e a ligação dupla é caracterizada por uma ligação do tipo σ e outra do tipo π (Pauling, 1960).

Pauling (1960) traz apontamentos acerca do caráter parcialmente iônico em ligações covalentes, em linha com o que Lewis (1916) já havia abordado em sua teoria do par eletrônico. Na TLV, Pauling aponta que existe uma transição contínua entre os extremos dos tipos de ligação química iônica e covalente, e o caráter iônico de uma ligação covalente reside na diferença na **eletronegatividade** entre os átomos participantes da ligação. O conceito de eletronegatividade está relacionado com a capacidade de um átomo atrair os elétrons para si em uma ligação, e quanto maior a diferença nessa propriedade entre átomos ligantes, maior o caráter iônico. É do caráter iônico de uma ligação covalente que se estrutura a classificação dessas ligações em polares e apolares. Pela mecânica quântica, o caráter parcialmente iônico em ligações covalentes pode ser explicado pela função de onda do sistema ser obtida da combinação linear das funções de onda da estrutura no extremo covalente e no extremo iônico, com a ligação entre os átomos sendo assim ressonante entre esses extremos. A estabilidade da molécula provém da energia de ressonância entre as estruturas covalente e iônica, com a estrutura com maior energia de ligação sendo a mais estável e contribuindo mais para o estado real da molécula (Pauling, 1960).

Com as discussões desta seção, pudemos trazer algumas das contribuições da TLV para a investigação da ligação química e covalente, sua natureza e o que provém sua estabilidade. Ainda com semelhanças na concepção de ligação covalente como compartilhamento de elétrons, a descrição da mesma a partir dos princípios da mecânica quântica levaram a TLV a ser muito incorporada na comunidade científica e trouxe importantes avanços para o entendimento da ligação química e suas especificidades. A obra de Pauling (1960) passa a ser considerada um marco na história da teoria de valência e estrutura molecular. No contexto de ensino-aprendizagem, a TLV é uma das principais teorias abordadas em LD para graduação e pós-graduação, e muitas de suas ideias são adaptadas para livros com simplificações e abstrações que podem levar a obstáculos ao entendimento ontológico do conceito e de suas especificidades, como apontado por Silva e Roque (2011).

3.2.2 A Ligação Química e Covalente na Teoria do Orbital Molecular

Na abordagem TOM, orbitais atômicos pertencentes aos átomos que irão formar a molécula se combinam para formar novos orbitais pertencentes à molécula, chamados de **orbitais moleculares**. Essa combinação é possível ao considerar, próximo ao núcleo, similaridade entre as funções de onda que descrevem os orbitais moleculares e atômicos. Assim como orbitais atômicos, orbitais moleculares podem ser considerados a partir dos resultados de funções de onda do elétron, representados em três dimensões no espaço (Hund, 1929; 1977; Mulliken, 1970).

A Combinação Linear de Orbitais atômicos (CLOA) é um método que possibilita o tratamento da molécula pela ocupação dos orbitais moleculares pelos elétrons pertencentes aos átomos. Na CLOA, a sobreposição de dois orbitais atômicos leva a formação de dois orbitais moleculares: um ligante e um antiligante. O orbital molecular ligante possui menor energia em relação aos orbitais atômicos de origem e, dessa maneira, quando ocupado por elétrons contribui para uma diminuição na energia potencial da molécula. Já o orbital molecular antiligante é superior em energia comparado aos orbitais atômicos originários e sua ocupação por elétrons leva a um aumento na energia potencial. A ordem com que os elétrons são distribuídos pelos orbitais nesse método depende do nível de energia e da simetria dos orbitais, respeitando o princípio de exclusão de Pauli e da regra de Hund (Baltieri, 2020; Hund, 1929; 1977; Mulliken, 1970).

Hund (1929) e Mulliken (1970) discutem as relações entre o potencial coulômbico de orbitais moleculares e a formação de uma molécula. Ao ocupar um orbital molecular ligante, um elétron possui menor potencial coulômbico em relação ao potencial quando pertencia ao orbital atômico. Com isso, a ocupação desse orbital ligante resulta em uma força de atração entre os átomos, favorecendo a ligação química e a estabilidade da molécula. O contrário se dá quando o elétron passa para um orbital molecular antiligante, de maior energia que o orbital atômico que se encontrava, contribuindo para a repulsão entre os átomos.

Da relação entre elétrons ocupando orbitais moleculares ligantes e antiligantes, obtida pela aplicação do método CLOA, surgem conceitos importantes como a ordem de ligação e a Energia de Dissociação da Ligação (BDE, do inglês¹⁰).

¹⁰ Bond Dissociation Energy.

A ordem de ligação é dada pela metade da diferença entre elétrons ligantes e antiligantes. De maneira geral, uma ordem de ligação maior do que um indica que existem mais elétrons ligantes e, portanto, contribuindo para a estabilização da molécula, do que elétrons antiligantes que desestabilizam a molécula (Mulliken, 1970).

Acerca da BDE e sua relação com a distribuição de elétrons em orbitais moleculares, Mulliken (1970, p. 208, tradução nossa¹¹) discorre:

Elétrons cuja presença em uma molécula tende a aumentar a energia de dissociação ou diminuir a distância internuclear (...) podem ser ditos como terem poder de ligação positivo, ou ser elétrons ligantes; e vice-versa. Também, elétrons não promovidos cujas órbitas têm tamanho da ordem da distância internuclear mostram forte poder de ligação também. Elétrons em órbitas largas não-penetrantes devem ser facilmente ionizados, e devem mostrar poder de ligação zero. Elétrons promovidos devem mostrar poder de ligação pequeno ou negativo, ao menos que o tamanho do orbital ou outras condições sejam muito favoráveis.

Mulliken (1970) aponta que a definição de BDE a partir de orbitais moleculares é especialmente útil para moléculas heteropolares e poliatômicas, colocando que, particularmente devido à hibridização, a BDE derivada de orbitais ligantes e antiligantes podem diferir consideravelmente.

Graficamente, a origem de orbitais moleculares ligantes e antiligantes reside no tipo de interferência gerado pela combinação das funções de onda que representam os orbitais atômicos. Interferências construtivas, em que os sinais das funções de onda combinada são iguais, levam a um aumento na amplitude da função de onda entre os núcleos. Com isso, a densidade eletrônica nessa região também se torna maior, aumentando a probabilidade de um elétron ser encontrado na região, descrita pelo quadrado da função de onda do elétron. Em interferências destrutivas, observa-se os efeitos contrários na amplitude da função de onda, na densidade eletrônica na molécula e na probabilidade de o elétron ser encontrado na região formada (Hund, 1977; Mulliken, 1970).

¹¹ Electrons whose presence in a molecule tends to make the dissociation energy large, or the internuclear distance small (...) may be said to have positive bonding power, or to be bonding electrons; and conversely'. Also, 'unpromoted electrons whose "orbits" are of the order of size of nuclear distance show strong bonding power. Electrons in large non-penetrating orbits should be as good as ionized, and should show zero bonding power. Promoted electrons should show small or negative bonding power unless orbit size or other conditions are very favourable.

As ligações múltiplas são explicadas na TOM pela simetria dos orbitais participantes da ligação. A combinação frontal de orbitais atômicos que possuem simetria cilíndrica em torno do eixo z leva à formação de ligações do tipo *sigma*, enquanto a combinação de orbitais perpendiculares ao eixo z formam ligações do tipo *pi* (Hund, 1977; Mulliken, 1970).

Na TOM, considera-se que os orbitais moleculares se estendem por ambos os núcleos, assim os elétrons se movimentam livremente por ela, com a ideia de que estão distribuídos em orbitais *deslocalizados*, mantendo os átomos unidos. Os orbitais atômicos não fazem mais parte do sistema e a molécula é entendida como um todo composta por todos os elétrons, em um sistema diferente do inicial formado pelos átomos separados (Baltieri, 2020; Hund, 1977; Mulliken, 1970).

A TOM se consolidou e popularizou rapidamente dentro da comunidade científica por uma série de fatores, como a importante descrição que traz da estrutura eletrônica de moléculas e também pela maior facilidade na aplicação da CLOA, em relação às aplicações matemáticas envolvidas na TLV, por exemplo. Ainda assim, encontram-se aproximações entre as considerações epistemológicas e ontológicas para a LC em ambas essas teorias (Baltieri, 2020).

Como considerações gerais dessa seção, temos que diferentes teorias e modelos da ligação química e covalente concebem, a partir de compromissos epistemológicos e ontológicos próprios, o conceito da LC. Alguns dos principais compromissos, características e rede de conceitos associadas a LC foram discutidos a partir de três dessas principais teorias (Lewis, TOM e TLV), a partir dos modelos Clássico e Quântico para a ligação. Essas particularidades muitas vezes se mostram usadas em mesmo contexto sem distinção adequada por estudantes, levando a obstáculos ao ensino e compreensão do conceito (Fernandes, 2019; Rozentaliski, 2013; Silva; Roque, 2011). Assim, entender essas particularidades e os compromissos que definem e diferenciam as diferentes visões para a LC se mostra um importante passo para avaliar adequação e coerência de diferentes contextos de formação e aplicação do conceito, como em discursos de estudantes e em trechos de LD. Da análise desses contextos, é possível inferir acerca de possíveis impactos ao processo de ensino-aprendizagem, considerando prováveis obstáculos e potencialidades que podem emergir do contato com esses contextos.

4 PERCURSO METODOLÓGICO

Nos capítulos anteriores, foram introduzidas algumas das utilizações do conceito de **LC** no ensino de Ciências, visando demonstrar seu papel central no estudo de diferentes áreas da Química. Baltieri (2020) investigou o conceito em diferentes domínios genéticos, identificando sua gênese e desenvolvimento dentro da comunidade científica, a polissemia em torno do conceito e CA de estudantes.

O PC para o conceito de LC, proposto por Baltieri (2020), mostra-se como uma ferramenta com potencial para analisar interações em discursos em sala de aula de Ciências, textos e no planejamento e execução de processos de ensino-aprendizagem, sobretudo na área da Química.

Esta pesquisa busca contribuir para a utilização desse PC, a fim de que se torne uma ferramenta com potencial heurístico de se trabalhar com a pluralidade de significados em torno do conceito em sala de aula. Para isso, buscamos aprimorar as informações no domínio microgenético para o perfil e explorar algumas de suas potencialidades em processos de ensino-aprendizagem.

4.1 Problema e Questões de Pesquisa

A fim de atingir as contribuições pretendidas, definimos o problema de pesquisa descrito a seguir de modo que, ao buscar respondê-lo, nos sirva como guia durante todo o desenrolar da pesquisa:

→ Problema de pesquisa: Em que medida o Perfil Conceitual da Ligação Covalente se apresenta como potencial ferramenta para mapear os modos de pensar e as maneiras de falar sobre o conceito em contextos de ensino-aprendizagem de Química no âmbito do Ensino Superior?

De modo a operacionalizar os processos de escolha da metodologia de coleta e análise de dados, dos referenciais teórico e metodológico que irão dirigir as discussões da pesquisa e, por fim, responder ao problema proposto, elaboramos duas questões de pesquisa.

A Primeira Questão (Q1) se refere ao processo de refinamento do domínio microgenético do PC de LC proposto:

Q1 – “Quais compromissos epistemológicos e ontológicos acerca da LC podem ser identificados a partir de um questionário aplicado a graduandos de Química do Ensino Superior?”.

A segunda questão de pesquisa (Q2) se relaciona com a análise de alguns dos principais LD utilizados no ensino de Química Inorgânica para o Ensino Superior no Brasil:

Q2 – “A partir do Perfil Conceitual da Ligação Covalente, como os diferentes modos de falar e maneiras de pensar acerca desse conceito emergem em textos de Livros Didáticos de Química Inorgânica no Ensino Superior?”

Os métodos e materiais de coleta e análise de dados que estruturaram essa pesquisa, as justificativas que conceberam as escolhas e a descrição de como foram aplicadas e desenvolvidas se encontram nas próximas seções deste capítulo.

4.2 Refinamento do domínio microgenético

A primeira etapa da pesquisa tem como objetivo principal expandir a exploração do DM para o conceito da LC, a partir da aplicação do questionário desenvolvido por Baltieri (2020) a um maior e mais plural número de estudantes. Com isso, possibilitar traçar novos diálogos, aproximar e articular os dados advindos das diferentes fontes de dados, de maneiras a estabelecer as categorias e temas epistemológicos e ontológicos que retratam a heterogeneidade de pensamento verbal em torno da LC. Do estabelecimento de um perfil mais robusto, de modo mais amplo, a pesquisa visa contribuir para que professores, estudantes e outros pesquisadores possam explorar as potencialidades do PC da LC dentro de contextos de ensino-aprendizagem.

Na construção de um PC, algumas estratégias se consolidaram na exploração das concepções acerca do conceito nos domínios ontogenético, microgenético e sociocultural. Como revisado na seção 1.5, uma das estratégias mais comumente utilizadas reside na proposição de categorias que abarquem os compromissos ontológicos e epistemológicos identificados a partir de estudos históricos, filosóficos e também de revisões na literatura de concepções alternativas acerca do conceito em questão (Mortimer *et. al.*, 2014b).

Com as categorias construídas, é comum, em um segundo momento, uma confirmação e expansão pela análise no contexto microgenético, em uma validação empírica, como realizado por Picón, Sevia e Mortimer (2020). Para isto, é possível analisar situações em que o conceito pode emergir em suas diferentes concepções, como episódios de ensino-aprendizagem, entrevistas e questionários com alunos e professores. Do diálogo integrado entre as informações levantadas e analisadas nos

domínios ontogenético, sociocultural e microgenético, é possível construir um PC representativo da heterogeneidade de um conceito (Picón; Sevian; Mortimer, 2020).

Para o aprofundamento do diálogo entre os compromissos oriundos das diferentes fontes de dados, em um primeiro momento foi avaliado a reaplicação do Questionário (em Anexo) elaborado por Baltieri (2020), a fim de evocar concepções de estudantes acerca da LC em eventos de curto espaço de tempo.

No Programa de Pesquisas em PC, a elaboração de questionários para análise do conceito no domínio microgenético tem como principal objetivo possibilitar, aos respondentes, utilizar diferentes concepções de um conceito a partir de diferentes contextos de aplicação. Dessa maneira, é possível identificar a heterogeneidade do pensamento verbal em torno de um conceito dentro de um grupo representativo, como estudantes de certo nível de ensino, professores ou profissionais de uma área. Para a elaboração dessas perguntas, Coutinho, El-Hani e Mortimer (2014) apontam duas estratégias principais utilizadas: pelo acompanhamento do cotidiano dos respondentes, como situações em sala de aula; e pela seleção de casos controversos de utilização do conceito identificados na revisão da literatura histórica, filosófica e de concepções alternativas.

As perguntas que compõem o Questionário foram elaboradas por Baltieri (2020) de modo a possibilitar, aos respondentes, utilizar os diferentes modos de pensar e formas de falar sobre o conceito de LC para resposta de problemas reflexivos e explicativos. A formulação das mesmas se deu a partir de casos de utilização do conceito identificados nas revisões da literatura que abordam a gênese e desenvolvimento do conceito e das concepções alternativas identificadas em estudantes.

As respostas obtidas por Baltieri (2020) encontraram respaldo nas categorias previamente propostas, a partir das revisões narrativa e sistemática, para o PC de LC. Uma das grandes ressalvas, como apontado pelo próprio autor, fica por conta do baixo número de respondentes (quatro) e do único contexto em que estes se apresentam (do mesmo curso de Química). Com isso, uma hipótese levantada é de que a articulação entre as fontes de dados pode ter sido limitada, sobretudo no domínio microgenético.

Com isso em vista, foi proposta a reaplicação do Questionário, uma vez que este foi validado por Baltieri (2020) em conjunto com um especialista, e que se mostrou, mesmo para um baixo número de respondentes, adequado para a coleta de

dados proposta. De maneira a fortalecer as contribuições do questionário e, consequentemente, refinar a exploração do domínio microgenético, a reaplicação se deu para um número maior de respondentes e de diferentes cursos e instituições de ensino, buscando por uma fonte de dados mais plural e diversificada.

Para isso, em um segundo momento foi feita a escolha pelos participantes desta etapa da pesquisa, a partir de alguns critérios que visavam trazer maior pluralidade ao *corpus* de análise.

Para isso, foi considerado os diferentes cursos de Química da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (UNESP), tendo em vista seu impacto e relevância no cenário do Ensino Superior a nível estadual e nacional, e também a pluralidade dos estudantes, espalhados pelos seus diferentes *campi*. Por essa escolha também entrou em consideração a possibilidade de contato facilitado com professores desses cursos, devido serem da mesma instituição dos pesquisadores, e o que possibilitou a aplicação presencial dos questionários aos estudantes. Com isso, foram escolhidos os cursos de Bacharelado e Licenciatura em Química dos *campi* UNESP: Araraquara, Bauru, Presidente Prudente e São José do Rio Preto.

Para cada *campi*, a escolha pela turma de estudantes em que o Questionário seria aplicado foi feita a partir do seguinte critério: deveria ser formada por estudantes que mais recentemente cursaram uma disciplina que abordasse as diferentes teorias e modelos mais explorados no estudo da ligação química, especialmente TLV, TOM e teoria de Lewis. Dessa maneira, entendemos que os estudantes tiveram contato com diferentes formas de conceber a LC e também contextos para aplicar essas concepções, de forma que as questões no Questionário podem servir como disparador para evocar tais concepções.

Assim, a partir da análise dos planos de ensino de todas as disciplinas obrigatórias dos diferentes cursos, foi elencada a disciplina que primeiro trazia as teorias e modelos pretendidos em seu conteúdo programático, e as turmas que mais recentemente cursaram tal disciplina foram as escolhidas para participar desta etapa da pesquisa. As disciplinas escolhidas para cada curso se encontram no Apêndice A, juntamente com disciplinas de outros cursos de Ensino Superior em Química do estado de São Paulo, que fizeram parte da segunda etapa da pesquisa e tem suas finalidades explicadas na próxima seção.

A aplicação do Questionário se deu com as respectivas turmas elencadas pelos critérios de escolha entre os meses de outubro e novembro de 2023. Ao todo, 76

estudantes dos seis cursos de Química dos *campi* da Unesp de Araraquara, Bauru, Presidente Prudente e São José do Rio Preto participaram dessa etapa da pesquisa, respondendo presencialmente às perguntas do Questionário. Para garantir a preservação da identidade dos participantes, todas as respostas foram anonimizadas a parti de siglas, formadas por uma letra entre M, N, O e P, com cada letra relacionada ao *campus* da UNESP que o estudante pertence, também anonimizado, e por um número referente ao estudante. Antes da aplicação do Questionário, foi apresentado o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido a todos os estudantes, informando sobre os objetivos da pesquisa, contribuições para a pesquisa e estudantes, possíveis riscos, regra de confidencialidade e sigilo das respostas e dados dos participantes, além da garantia de remoção de sua participação, mesmo após respondido as questões. O Termo foi elaborado de forma a garantir direitos e minimizar possíveis riscos inerentes aos participantes, e foi aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa da UNESP em 11 de outubro de 2023, parecer n. 6.422.945. O Termo completo se encontra no Apêndice B. Cada estudante que optou por participar da pesquisa e assinou o Termo, também ficou com uma cópia do mesmo para si, com as instruções e informações de contato dos pesquisadores responsáveis, caso optasse por excluir suas respostas e participação da pesquisa em qualquer momento antes da divulgação dos resultados, mesmo após a coleta de dados.

No Programa de Pesquisas em PC, a análise de resposta de questionários e entrevistas segue algumas estratégias características, a depender do objetivo pretendido. Um dos objetivos para questionários é identificar modos de se pensar característicos acerca do conceito e traçar relações entre estes modos e as categorias propostas para o PC pelas revisões histórica, filosóficas e da literatura de concepções alternativas dos estudantes. Posteriormente, pelo diálogo com os dados empíricos e da revisão, tornar as categorias previamente propostas mais coerentes e robustas, sendo possível reformulações e expansões das mesmas. As relações entre os modos de pensar e formas de falar sobre o conceito e as categorias podem ser traçadas a partir de uma abordagem indutiva-dedutiva, com a análise de que concepções ontológicas e epistemológicas são identificadas nas expressões usadas nas respostas (Coutinho; El-Hani; Mortimer, 2014; Gibbs, 2009).

Essa foi a estratégia adotada na presente pesquisa na etapa de análise das respostas ao Questionário, tendo em vista o objetivo de sua reaplicação: identificar modos de pensar e maneiras de falar sobre o conceito de LC e traçar possíveis

relações com as categorias epistemológicas e ontológicas identificadas durante as revisões sistemática e narrativa, realizada por Baltieri (2020). Dessas relações, busca-se validar as zonas do PC da LC, mostrados nos Quadros 5, 6, 7 e 8, a partir da análise acerca da coerência dos compromissos que estabilizam as zonas e aqueles identificados durante as diferentes etapas de exploração dos domínios genéticos.

Ainda com relação ao refinamento do domínio microgenético, uma possibilidade não explorada por Baltieri (2020) na construção do PC para LC seria a investigação de compromissos **axiológicos**.

A dimensão axiológica está associada com os valores e finalidades que um sujeito atribui a um objeto. Ao investigar essa dimensão, leva-se em conta o papel das emoções no desenvolvimento das funções superiores humanas e as relações afetivas-cognitivas do sujeito com o conceito e suas formas de representação (Mattos; Rodrigues, 2007).

A proposta de se investigar compromissos axiológicos acerca de um conceito, em pesquisas de PC, encontra respaldo na ideia do aprendizado emocional e do desenvolvimento afetivo. Ao se familiarizar com um novo conceito, o sujeito passa a reconhecer sua importância e se sentir mais confortável para confrontar as novas ideias com as que teve contato anteriormente. Além disso, leva-se em conta a relação de aprendizado e motivação, uma vez que a falta de afetividade com um objeto de estudo e de motivação para aprender se colocam como obstáculos axiológicos de aprendizagem (Mattos; Rodrigues, 2007).

Vemos esses pontos como uma grande contribuição no Programa de Pesquisas em PC, e acreditamos que a implementação da investigação da dimensão axiológica leva a perfis com grande capacidade heurística. No entanto, também vemos que a adoção desse tipo de investigação deve ser avaliada pelo pesquisador, a depender do conceito central que se perquire .

Podemos tomar alguns exemplos de pesquisas em que a investigação da dimensão axiológica acerca de um conceito trouxe importantes contribuições.

Sodré (2008) buscou investigar elementos históricos, concepções de alunos e professores e abordagens em LD sobre o tema “alimentação saudável”, sob o ponto de vista da física. Apesar de uma hipótese inicial da autora de que as concepções levantadas poderiam se priorizar em torno do conceito de energia, relações de finalidade e afetividade com a comida tomaram parte em muitas das concepções, sobretudo por alunos e professores. Nestas concepções, a finalidade da alimentação

se estende para além de fornecer nutrientes e energia para o corpo. Foram levantadas relações de comida com identidade e pertencimento a um grupo social, como alimentos para confraternizações, demonstração de amizade e/ou agradecimento, entre outros. Verificou-se um simbolismo em torno do alimento, de cunho religioso, social ou cultural, que passa a ter valores e finalidades atribuídas distintas para diferentes grupos sociais.

Bastos e Mattos (2009) investigaram concepções de poluição sonora e saúde auditiva em estudantes de ensino médio, buscando introduzir situações que favorecessem a interdisciplinaridade do tema com conhecimentos da física, fonoaudiologia e fisiologia da audição. Em algumas associações dos alunos, foi possível identificar marcas de atribuição de valores e finalidades ao tema de “poluição sonora”. O volume de um som ser alto seria associado com poluição sonora caso fosse um som que não gostassem, porém não seria assim considerado caso fosse, por exemplo, de uma música que gostam. Do ponto de vista físico, ambos os casos poderiam se enquadrar como poluição sonora.

Durante a investigação dos domínios genéticos na construção do PC de Herança Biológica, Reis (2018) constata a forte influência de valores e crenças na significação desse conceito, o que a leva a ideia de explorar a dimensão axiológica. Em um primeiro momento, a autora destaca que a axiologia permeava os compromissos epistemológicos e ontológicos, identificados durante a investigação dos domínios genéticos sociocultural, ontogenético e microgenético. Assim, uma primeira hipótese levantada era de que os compromissos epistemológicos e ontológicos estabilizavam as zonas do PC propostas, enquanto os compromissos axiológicos as modulavam. Com o aprofundamento das investigações, a autora reconhece também que os compromissos axiológicos podem estabilizar algumas zonas, passando assim a compor a matriz semântica construída para o perfil. Tal reconhecimento vem da peculiaridade do tema e dos valores e crenças atribuídos por sujeitos ao conceito, o que pode levar ao papel da dimensão axiológica ser mais acentuado em algumas situações e contextos.

Na revisão dessas e outras pesquisas da área que exploraram a dimensão axiológica acerca de um conceito na proposição de um PC, pudemos traçar algumas particularidades em relação ao conceito a ser investigado. Em geral, o conceito explorado se mostra atrelado a crenças ou valores de uma cultura, podendo ser atribuídas interpretações de cunho mais afetivo e cognitivo por um sujeito durante

seu desenvolvimento. Isso afeta diretamente na escolha por um significado que tenha relação com os valores do sujeito em detrimento de significados mais próximos de um ponto de vista científico, a depender do contexto e do sujeito.

Por exemplo, para o conceito de alimentação saudável, Sodré (2008) verificou relações de comida com prazer, afetividade e cultura em que o sujeito se insere em alunos que estavam familiarizados também com o ponto de vista da física para valor nutricional de um alimento. Em diferentes contextos, os significados de cunho afetivo-cognitivo poderiam inclusive se sobressair sobre os científicos.

Para o conceito de LC, em específico, entendemos não ser usualmente significado sob aspectos afetivo-cognitivos. Tal entendimento advém de nossa análise dos domínios genéticos, em que não encontramos significados que atrelem este conceito em específico com valores e crenças em diferentes culturas. Assim, vemos que a exploração da dimensão axiológica traria poucas contribuições para a estabilidade das zonas do PC para o conceito de LC. No entanto, vale frisar que durante todas as etapas de análise dos dados foi considerado a possibilidade de serem incluídos compromissos dessa categoria, o que não foi observado para os dados extraídos das fontes analisadas.

4.3 Análise de livros didáticos a partir do Perfil Conceitual da Ligação Covalente

Para responder à segunda questão de pesquisa (Q2), buscou-se levantar, em textos de LD usados em cursos de Química no Ensino Superior, as concepções para LC utilizada pelos autores ao longo dos textos. Da identificação dos compromissos característicos das diferentes concepções, traçar possíveis relações com as zonas do PC da LC, proposto por Baltieri (2020), expandido e revisado durante a primeira etapa desta pesquisa. Com essas relações estabelecidas, analisar possíveis impactos e potenciais no uso desses livros em contextos de ensino-aprendizagem que envolvam o conceito da LC, tendo em vista sua polissemia e especificidades.

Em um primeiro momento, foram investigados quais os LD que iriam compor o *corpus* de análise dessa etapa da pesquisa. Para isso, o procedimento metodológico foi adaptado do utilizado por Freitas *et al.* (2019). Os autores caracterizaram os principais livros utilizados para o ensino de Eletroquímica em cursos de Licenciatura em Química, a partir da bibliografia recomenda de disciplinas que objetivavam o ensino de eletroquímica em seus planos de ensino.

Em um primeiro momento, definimos os cursos em nível superior de Química que teriam seus planos de ensino investigados. Os cursos escolhidos foram todos os de graduação em Química (Licenciatura e Bacharelado em Química, Bacharelado em Química Industrial e Licenciatura em Ciências com Habilitação em Química) oferecidos por instituições de Ensino Superior públicas do estado de São Paulo, cadastrados no Ministério da Educação (MEC)¹² e em atividade para o ano de 2021. Tal escolha se deu dada a relevância desses cursos e dessas instituições no contexto do Ensino Superior em Química no Brasil. Ao todo, foram encontrados 34 cursos, espalhados por 23 *campi* universitários do estado. Todos os cursos e *campi* que tiveram suas disciplinas analisadas durante a pesquisa encontram-se no Apêndice A.

A busca pelos planos de ensino ou programa das disciplinas dos cursos escolhidos foi feita pelos projetos pedagógicos dos cursos, quando disponíveis, por catálogo de disciplinas, sistema próprio da universidade ou, para quando não houvesse tais informações disponíveis no site da instituição, via *e-mail*. Com exceção do curso de Licenciatura em Química ofertado pela Univesp, para todos os demais 33 cursos foram encontradas as informações desejadas. Os *links* de acesso para informações das disciplinas de cada curso ou o meio que foi utilizado para obtenção delas se encontram descritos no Apêndice A. Vale citar que, para *campi* que oferecem mais de um curso de Química, em alguns casos algumas das disciplinas ofertadas para ambos os cursos possuem o mesmo plano de ensino, o que pode ser verificado quando o *link* para acesso dos planos é o mesmo no Apêndice A.

Com posse dos planos de ensino ou programa de disciplinas de todas as disciplinas ofertadas pelos cursos eleitos, foi pesquisado o descritor “ligação(ões) covalente(s)” e “ligação(ões) química(s)” nas ementas, objetivos ou conteúdo programático de cada uma delas. Após essa primeira filtragem, foi escolhida, para cada um dos 33 cursos, uma disciplina que tivesse como um de seus objetivos explícitos o ensino de teorias de ligação química, como TOM, TLV, teoria de Lewis, entre outros. Em dois casos, para um mesmo curso surgiram duas disciplinas com esse objetivo em comum, porém uma delas era obrigatória para o curso e a outra, eletiva ou optativa. Em ambos os casos, foi escolhida a disciplina obrigatória para análise da bibliografia recomendada.

¹² A pesquisa se deu pelo Cadastro Nacional de Cursos e Instituições de Educação Superior (Cadastro e-MEC) pelo site <https://emec.mec.gov.br/>, em 06 de março de 2021.

Com as 33 disciplinas designadas, suas bibliografias recomendadas foram analisadas para, enfim, selecionar os LD que irão compor essa etapa da pesquisa. Nas bibliografias analisadas, foram encontrados 27 livros didáticos, considerando-se um único livro para o caso de aparecer em duas ou mais edições diferentes. Para a análise, optou-se pela versão mais recente de cada livro e em seu idioma original, a fim de preservar as maneiras de falar sobre o conceito de LC escolhidos pelos autores de cada obra. Assim, dos 27 livros identificados, foram escolhidos aqueles com cinco ou mais citações nas bibliografias recomendadas para serem analisadas, de forma a buscar por obras que sejam de reconhecida relevância no Ensino Superior de Química contemporâneo, a nível estadual e, possivelmente, nacional. Com esse critério, chegou-se a um total de três livros, mostrados na Tabela 1. Mesmo que não fosse um critério para escolha, todos os livros que emergiram dessa etapa de seleção foram livros de Química Inorgânica.

Tabela 1 – Livros didáticos analisados, pela análise das bibliografias recomendadas nas disciplinas escolhidas.

Livro (por edição mais recente citada)	Número de cursos que citam
ATKINS, P. W.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLEW, M.; ARMSTRONG, F. HAGEMAN, M. Shriver & Atkins Inorganic Chemistry . 5. ed., New York: W. H. Freeman and Company. 2010	33 (todos)
LEE, J. D. Concise Inorganic Chemistry . 5. ed. London: Chapman & Hall Ltd. 1996.	22
COTTON, F. A.; WILKSON, GEOFFREY; MURILLO, C.A.; BOCHMANN, M. Advanced Inorganic Chemistry . 6. ed. New York: Jon Wiley & Sons. 1999.	5

Fonte: elaborado pelos autores.

Após escolhidos os livros, deu-se início a etapa do levantamento e extração de dados, através de uma primeira leitura flutuante inicial. Nessa leitura, identificou-se e transcreveu-se trechos em que o conceito de LC era abordado, quer seja para ser explicado, quer seja para explicar fenômenos, propriedades e características de compostos.

Em posse dos trechos escolhidos, passou-se para a etapa de identificação da concepção principal associada com a LC em cada um deles. Pela análise dos

compromissos epistemológicos e ontológicos que estabilizam cada uma dessas concepções, estas foram caracterizadas enunciativamente a partir das zonas do PC da LC, suas categorias e temas. Com isso, foi possível traçar relações entre essas concepções e as zonas do PC, bem como em quais tipos de contexto e problemáticas são mais comumente utilizadas para explicar.

As relações entre as diferentes concepções, que surgiram no decorrer da análise dos livros, possibilitaram diferentes análises acerca das maneiras que esses LD abordam a LC.

As frequências com que concepções características de diferentes zonas foram utilizadas e em quais contextos possibilitaram inferir acerca da predominância de visões epistemológicas em detrimento de outras para determinadas explicações. Tendo em vista o público-alvo a que se destina as obras analisadas (estudantes do Ensino Superior), também foi possível analisar se as visões predominantes estão de acordo com os conhecimentos que os LD buscam mobilizar.

Outra possibilidade analisada foi acerca da coerência entre a concepção de LC característica de cada trecho e a rede de conceitos utilizada em combinação a ela, seja para explicar o contexto ou ter suas características explicadas. O uso indiscriminado de conceitos advindos de teorias com visões epistemológicas e ontológicas distintas podem trazer obstáculos para a compreensão das especificidades, limites e aplicabilidades que justificam a escolha de uma concepção em detrimento de outras para um contexto. Com isso, o PC da LC foi utilizado de modo a fornecer essas especificidades e a rede de conceitos associadas às diferentes concepções de LC, possibilitando analisar e discutir sobre a coerência nos seus usos ao longo das obras e possíveis incongruências.

Por fim, também pudemos analisar se há uma abordagem do conceito da LC em uma perspectiva histórica e plural, legitimando as diferentes formas de conceber o conceito, desde que discriminando contextos adequados para tal.

Em uma análise geral dessas possíveis inferências discutidas, podemos apontar possíveis contribuições e obstáculos do uso dos LD em processos de ensino-aprendizagem relacionados com o conceito da LC. A análise dos enunciados a partir do PC possibilita depreender se essas obras oportunizam aos leitores, sobretudo estudantes, contato com a polissemia do conceito da LC e experencia-los em uma pluralidade de contextos. Entendemos que essas ações contribuem significativamente para a estabilidade do pensamento conceitual da LC, isto é, a capacidade de

internalizar esse conceito e seus significados, articulada com a capacidade de externa-los em situações e contextos adequados. Do entendimento dos limites e especificidades de uma concepção, demarcados pelos compromissos epistemológicos e ontológicos da zona que abarca tal, o sujeito passa a ter maior domínio para transitar entre diferentes concepções e contextos. Em contrapartida, o PC também possibilita analisar situações em que concepção é usada de forma indiscriminada com conceitos e em contextos incoerentes com os compromissos que estabilizam essa concepção, de forma a inferir sobre possíveis obstáculos a compreensão e domínio do pensamento conceitual pelo sujeito.

4.4 Considerações do Percurso Metodológico

Do diálogo entre os resultados analisados em cada etapa do percurso metodológico descrito nesse capítulo, buscou-se levantar os dados pertinentes para responder ao problema geral da pesquisa:

“Em que medida o Perfil Conceitual da Ligação Covalente se apresenta como potencial ferramenta para mapear os modos de pensar e as maneiras de falar sobre o conceito em contextos de ensino-aprendizagem de Química no âmbito do Ensino Superior?”.

A escolha por cada instrumento de coleta de dados foi pensada de forma a possibilitar o levantamento de compromissos característicos dos diferentes significados da LC a partir de fontes de dados plurais e com relevância no contexto do Ensino Superior de Química.

Para a análise dos dados coletados, seguiu-se procedimentos metodológicos consagrados dentro do Programa de Pesquisas em PC de forma a vislumbrar potencialidades do PC da LC como ferramenta de análise e identificação dos diferentes modos de pensar e maneiras de falar sobre o conceito. Em conjunto com referenciais teóricos acerca do ensino-aprendizagem da LC, foi possível trazer possibilidades de discussões entre esses modos de pensar e maneiras de falar com paradigmas, obstáculos e potencialidades identificadas nas concepções de estudantes para o tema.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os principais achados a partir das diferentes fontes de dados investigadas e discutidos os resultados, sob a luz dos fundamentos teóricos e metodológicos do Programa de Pesquisa em PC.

5.1 Análise das respostas ao Questionário para exploração do domínio microgenético e revisão do Perfil Conceitual da Ligação Covalente

A análise das respostas Questionário foi feita buscando levantar as diferentes concepções de LC e rede de conceitos associada que os estudantes utilizaram visando resolver os problemas contextualizados expostos. Das concepções identificadas, em um segundo momento buscou-se articular com as categorias e temas epistemológicos e ontológicos que Baltieri (2020) levantou a partir das revisões narrativa e sistemática, de modo a conferir respaldo entre os dados oriundos dos diferentes domínios genéticos explorados.

Após uma primeira análise de todas as respostas ao Questionário, foram elencados seis significados para a LC utilizada pelos estudantes. Com os compromissos característicos que demarcam cada significado e a rede de conceitos relacionada, pudemos construir caracterizações enunciativas de cada um deles, numeradas de S1 a S6 e mostradas no Quadro 8.

Quadro 8 - Significados da LC e caracterizações enunciativas identificadas nas respostas ao Questionário.

Significado	Caracterização Enunciativa
S1	<i>A LC é uma interação que forma moléculas ou substâncias</i>
S2	<i>A LC resulta de propriedades entre os átomos que se ligam.</i>
S3	<i>A LC como resultado de um cálculo, um número obtido empiricamente.</i>
S4	<i>A LC é o compartilhamento de elétrons entre átomos.</i>
S5	<i>A LC é a sobreposição de orbitais atômicos.</i>
S6	<i>A LC é a formação de orbitais moleculares deslocalizados pela molécula</i>

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

As respostas são identificadas a partir da sigla referente à questão do Questionário, numerados de Q01 a Q10, e a sigla correspondente ao respondente da questão em análise. Para a sigla dos respondentes, temos que são formadas por uma letra entre M, N, O e P, referentes ao *campus* da UNESP que o estudante pertence,

não identificado por questões de ética e preservação da identidade, e por um número aleatório relacionado com o estudante, a fim de manter uma identificação possível para caso o estudante contatasse os pesquisadores com intuito de excluir suas respostas e participação na pesquisa.

5.1.1 Características e emergências do Primeiro Significado nas respostas ao Questionário

O primeiro significado (S1) foi identificado a partir de compromissos epistemológicos e ontológicos em que não há uma reflexão acerca da natureza da formação de uma ligação. Ela *acontece*, como forma de unir átomos isolados em um composto químico, como uma molécula. Esse entendimento da LC leva em conta compromissos epistemológicos *realistas*, em que ligações são “combinações” de partes químicas, sem discutir a natureza de tal, e que podem ser feitas e desfeitas, como no decorrer de reações químicas. A rede de conceitos utilizada pelos estudantes, ao lançarem mão desse significado em respostas ao Questionário, inclui termos como “interação”, “combinação” e “formação de uma molécula”. Como exemplo, temos a resposta do estudante N13 para a Q01 do Questionário:

“Uma ligação química é uma interação que ocorre pelas subpartículas de moléculas, átomos ou elementos” N13, Q01.

O S1 emergiu em com maior frequência nas respostas a questões que não requeriam a aplicação de teorias científicas específicas, sobretudo em Q01, Q03 e Q04.

Na Q01, de caráter aberto, esse significado foi o mais recorrente, sendo identificado em 33 respostas (43,4% do total) para definir a ligação química. Na resposta do estudante N13, por exemplo, observamos a concepção da LC como um fenômeno espontâneo, sem a análise de sua natureza ou dos mecanismos envolvidos.

Essa concepção também foi a mais recorrente na Q03, com 31 ocorrências (40,1%), caracterizada pela representação simplificada de átomos em posições mais próximas para conceber a formação de moléculas, conforme ilustrado na Figura 6. Nessa resposta, é possível observar que os compromissos concebem a ligação entre esses átomos pela simples aproximação dos átomos ligantes, sem haver uma indicação de como é formada a ligação.

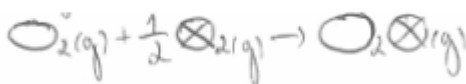


Figura 6 – Resposta do estudante M01 para a Q03.

Fonte: dados da pesquisa.

Em relação à Q04, observou-se em 16 respostas (21,0%) a utilização de S1 para explicar uma reação química, fundamentada na premissa de que a reação ocorre em virtude da formação ou ruptura de ligações. O estudante N07 exemplifica essa abordagem:

"A reação ocorre a partir da incidência de energia na forma de luz na molécula de CH₄, rompendo uma das ligações C – H, e na molécula de Cl₂, rompendo a ligação Cl – Cl. Com a possibilidade de realizar ligações, um Cl se liga ao C e o Cl restante se liga ao H retirado" N07, Q03.

Embora o excerto mencione a necessidade de um fator para a quebra das ligações (incidência de energia), não há discussão sobre os motivos que expliquem o porquê as novas ligações permanecem, e não retornam às moléculas originais (CH₄ e Cl₂). Assim, as LC nessa e nas demais respostas à Q03 em que foi identificado o S1, temos que ligações são feitas e desfeitas, sem uma discussão acerca do sentido preferencial em que isso ocorre e da natureza que explica essas mudanças.

Nas demais questões, a utilização do S1 não foi observada.

Pudemos verificar, para esse primeiro significado, um paralelo entre seus compromissos epistemológicos e ontológicos e aqueles que Baltieri (2020) agrupou dentro das categorias características do *Realismo*, na primeira zona do PC da LC proposto, sobretudo dentro da categoria *Inexistência*. Para ambos os casos, temos que a ligação é tida como algo *secundário* dentro dessas concepções; elas *ocorrem* e, com isso, forma moléculas, mas a razão ou natureza que explica ocorre se encontra ausente. Assim como analisado ao longo do Questionário, os significados característicos dessa zona incluem moléculas como *recombinação* de átomos e podendo ser *feitas* ou *desfeitas*. Dessa maneira, traça-se uma forte e consistente relação entre os diferentes domínios genéticos analisados, agora com um respaldo dentro do microgenético, a partir de diferentes contextos em que esse significado, seus compromissos característicos e a rede de conceitos envolvida emergem no pensamento verbal de estudantes.

Interessante também notar que nas respostas às mesmas questões (Q01, Q03 e Q04) analisadas por Baltieri (2020) também foram observadas uma significação da ligação a partir de compromissos similares: a ligação é tida como uma *interação* ou *junção* para formar moléculas, podendo ser *feita* ou *desfeita* a depender de fatores externos, como incidência de energia. Mesmo quando atrelados a uma rede de conceitos característica de visões epistemológicas distintas da primeira zona, como sobreposição de orbitais, tal uso é realizado sem discutir a natureza da ligação, mas pela simples verbalização desses conceitos. Isso denota uma aproximação e confirmação das relações estabelecidas por Baltieri e as que puderam ser levantadas e elencadas para esse primeiro significado.

5.1.2 Características e emergências do Segundo Significado nas respostas ao Questionário

O S2 pode ser enunciada da seguinte maneira: *“a LC resulta de propriedades dos átomos que se ligam”*. Assim, nos contextos em que foram utilizadas, esses significados explicam a LC a partir de características e propriedades dos átomos, como *diferença de eletronegatividade*, *caráter metálico e não-metálico*, mas sem explicar a ligação em si. A LC é tida como algo secundário, e sua natureza é discutida a partir da relação estabelecida com outros conceitos.

O S2 foi identificado em respostas a três questões: Q01, com seis ocorrências (7,8% das respostas); Q02, com doze ocorrências (15,8%); e Q4, com quarenta ocorrências (52,6%).

Para exemplificar o uso do S2 nas respostas à Q01, trazemos o extrato do estudante M09:

“Uma interação entre átomos ou moléculas de acordo com suas propriedades, refletindo assim com os arranjos dos elétrons de tais elementos” M09, Q01.

Nessa resposta, observamos a relação direta entre as propriedades dos átomos ligantes (ou moléculas) para explicar a ocorrência da ligação.

Para a Q02, em que se solicitava explicar, em específico, a LC, surgem algumas das propriedades dos átomos consideradas pelos estudantes que justificam a formação da ligação, como no exemplo do estudante P12:

“Ligação que envolve ametal-amedal ou ametal-hidrogênio resposta do estudante” P12, Q02.

Para a Q04, temos que o S2 foi o mais utilizado pelos estudantes, baseando-se nas propriedades dos átomos das moléculas em reação para explicar a cisão das ligações nos reagentes e a formação de novas ligações nos produtos, como na resposta do estudante M11:

“Por afinidade eletrônica, o cloro “atrai” o hidrogênio, quebrando a ligação” M11, Q04.

Para S2, semelhantemente ao que foi observado para o S1, não temos uma discussão acerca da natureza da LC em si, mas é derivada de outros conceitos estabelecidos para a área, sobretudo *eletronegatividade*. Das categorias que Baltieri (2020) construiu a partir da exploração dos domínios ontogenético e sociocultural, temos que esses mesmos compromissos epistemológicos e ontológicos são identificados na categoria *Dependência Incoerente*. Uma rede de conceitos similar, em que expressões como “diferença de eletronegatividade”, “ligação entre ametais”, também foram identificadas pelo autor em diferentes contextos de explicar e aplicar o conceito da LC. Assim, podemos apontar que há respaldo, dentro dos três domínios genéticos explorados, para a estabilização desse significado a partir de compromissos comuns identificados nos diferentes domínios.

Comparando os resultados identificados nas respostas ao Questionário obtidos por Baltieri (2020), observamos que esse segundo significado emergiu em respostas para a Q02 e Q04, assim como identificado na presente pesquisa, porém não emergiu em respostas à Q01. Temos, assim, que a presente pesquisa traz um novo contexto, dentro do domínio microgenético, em que estudantes conceberam propriedades de átomos para explicar um fenômeno. Ainda, esse significado também apareceu em respostas à Q05 da pesquisa de Baltieri (2020), o que não foi verificado em nossa investigação. Essas observações apontam que, mesmo com um baixo número de respondentes, é possível que emergências diferentes possam surgir, possivelmente decorrentes da interpretação à questão pelos estudantes a partir de suas próprias experiências pessoais.

5.1.3 Características e emergências do Terceiro Significado nas respostas ao Questionário

O terceiro significado (S3) identificado durante a análise das respostas ao Questionário foi enunciado como: “a LC como resultado de um cálculo, um número

obtido empiricamente”. Nas respostas em que S3 é utilizado, temos que a LC é expressa na forma de um *número*, associado com a *valência* característica de átomos, uma propriedade obtida a partir de cálculos de peso atômico.

Esse S3 emergiu em respostas a uma única questão ao longo de todo questionário: Q05, que foi elaborada justamente com o intuito de levantar possíveis visões de estudantes relacionadas à Teoria da Valência. Na análise das respostas, temos que esse significado emerge em 24 respostas (31,6% do total), sendo o significado mais recorrente para essa questão.

Como exemplo, nas respostas dos estudantes O01 e M06, ambas para a Q05, utilizam compromissos associados com a valência para explicar propriedades comuns entre diferentes elementos.

“Grupo A: todos do grupo quando formam íons tem o índice 2 (+2 ou – 2). Grupo B: quando formam íons tem o índice 1 (+1 ou – 1). Grupo C: quando formam íons tem o índice 3 (+3 ou – 3). Grupo D: quando formam íons tem o índice 2” O01, Q05.

“A: bivalentes. B: monovalentes. C: trivalentes. D: tetravalentes” M06, Q05.

Os compromissos epistemológicos e ontológicos característicos do S3, assim como a rede de conceitos, também foram identificados por Baltieri (2020) em sua investigação dos domínios ontogenético e sociocultural. Uma relação direta pode ser traçada entre esses compromissos e aqueles que estabilizam a categoria *Valência*, do tema epistemológico do Empirismo, em que a LC é concebida a partir de dados empíricos e expressada na forma de um número. Assim como nas respostas em que identificamos o S3, a rede de conceitos da categoria *Valência* também usa de termos como “valência” e “número de oxidação” para explicar contextos de aplicação. Com isso, podemos traçar um paralelo entre os compromissos identificados para o S3, a partir das respostas ao Questionário, e aqueles levantados por Baltieri (2020) na construção da categoria *Valência*. Com isso, esse significado se mostra presente nas diferentes fontes de dados e estabilizado a partir de compromissos constatados nos três domínios genéticos analisados.

Também é interesse observar que as respostas dos estudantes a partir desse significado foram exclusivas para a Q05 tanto na aplicação desta pesquisa quanto na de Baltieri (2020). Tal observação pode indicar que há uma certa tradição na

abordagem empírica, derivada de ideias como a *valência*, para explicar o número de ligações usualmente estabelecidas para determinados elementos.

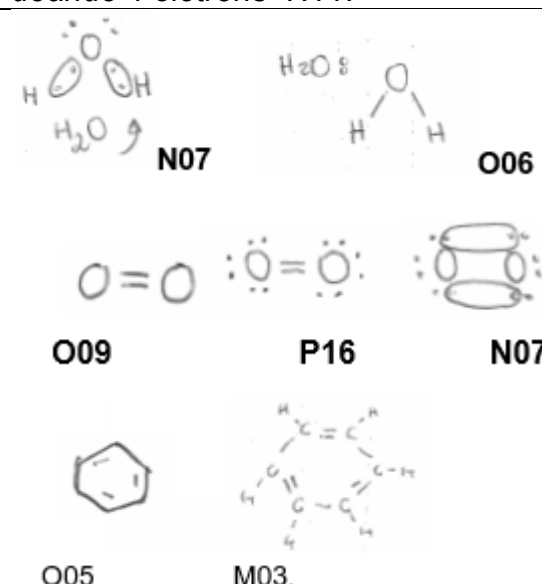
5.1.4 Características e emergências do Quarto Significado nas respostas ao Questionário

O quarto significado (S4) identificado ao longo das respostas ao Questionário abarca, diferentemente dos três primeiros, compromissos que buscam explicar a natureza da LC em si. Como maneira de agrupar as diferentes maneiras como foram representadas, podemos enuncia-las como “a LC é o compartilhamento de elétrons entre átomos”. Assim, esse significado se diferencia dos demais em uma visão epistemológica, concebendo a LC a partir de um tema característico do Racionalismo Clássico, e também ontologicamente, na qual a ligação passa de um ente concreto, que pode ser feito e desfeito, para um ente abstrato, o compartilhamento de dois elétrons por dois centros. As resoluções das questões em que identificamos esse significado engloba termos e conceitos como “camada de valência” e “octeto completo e incompleto” para explicar a ocorrência de LC entre átomos, sejam elas simples, duplas ou triplas.

O S4 foi o significado utilizado em um maior número de contextos, sendo identificado em respostas a nove questões, com exceção da Q08. A ocorrência desse significado em respostas a essas questões e exemplos para cada caso são mostrados no Quadro 9.

Quadro 9 - Usos e ocorrências do quarto significado nas respostas ao Questionário.

Questão	Extratos representativos	Ocorrência (%)
Q01	<i>“Uma ligação química consiste no compartilhamento de elétrons da camada de valência a fim de tornar a estabilidade eletrônica”</i> N02.	26 (34,2%)
Q02	<i>“A ligação covalente é a interação da eletrosfera dos átomos de maneira que os elétrons estejam compartilhados entre si, ou seja, 1 elétron pertence a eletrosfera de ambos os átomos”</i> M09.	55 (72,4%)
Q03	 M06.	31 (40,1%)
Q04	<i>Ocorre a quebra de ligação entre o carbono e o hidrogênio e em seguida o cloro se liga ao elétron livre do carbono. E por fim o H substituído entra no elétron livre do cloro na outra molécula”</i> M10.	4 (5,3%)

Q05	<i>“Grupo A: se estabilizam recebendo ou doando 2 elétrons. Grupo B: se estabilizam recebendo ou doando 1 elétron. Grupo C: se estabilizam ao receber 3 elétrons. Grupo D: se estabilizam recebendo ou doando 4 elétrons” N11.</i>	15 (19,7%)
Q06		76 (100%) para molécula de H₂O 76 / 100% para a molécula de O₂ 46 / 60,5% para a molécula de C₆H₆
Q07	<i>“As ligações pi, por serem separadas por uma ligação sigma, sofrem ressonância, fazendo as ligações pi mudarem de lugar, ajudando a estabilizar a molécula caso ela fique carregada. A ressonância iguala a energia e a distância das ligações” M11.</i>	37 (48,7%)
Q08	-	-
Q09	<i>“A molécula é polar por conta dos elétrons que ficaram livres do oxigênio. A polaridade faz com que a molécula tenha diferentes propriedades, como a estrutura da água, que é angular” P12.</i>	52 (68,4%)
Q10	<i>“Teoria do octeto (...) repulsão de elétrons livres” M03</i>	76/100%

Fonte: elaborado pelos autores.

A partir dos resultados obtidos e apresentados no Quadro 9, podem ser levantados algumas importantes observações.

O S4 foi o mais recorrente para explicar, em linhas gerais, a LC como o par de elétrons compartilhado entre dois centros, analisando as respostas à Q02. Essa concepção foi a predominante, representando mais de 70% das ocorrências. Em algumas respostas, buscou-se explicar a natureza dessa ligação, como na resposta do estudante P05, que relaciona o compartilhamento de dois elétrons por dois centros com o aumento da estabilidade dos átomos ao atingirem o octeto completo. Também interessante notar que foi um significado recorrente para a Q01, indicando que estudantes consideram que toda ligação química é, de alguma forma, covalente.

“Ligação covalente se trata de uma ligação em que os átomos participantes da ligação compartilham elétrons, com que os átomos atingem o octeto, assim se tornam mais estáveis” P05, Q02.

Com relação às representações de moléculas, temos que tanto na Q03 quanto na Q06 há uma grande recorrência dos estudantes utilizarem das estruturas de Lewis, representando pares de elétrons por traços ou pontos. Como observado por Fernandes (2019), se observa uma tendência nesse tipo de representação por estudantes de Ensino Superior, derivada do Racionalismo Clássico, mesmo em contextos em que concebem a LC como resultado de sobreposição de orbitais.

Uma tendência similar pode ser observada em respostas à Q07, em que os estudantes deveriam buscar explicar a constatação empírica das ligações iguais, em tamanho e força, entre os átomos de carbono na molécula do benzeno. Apesar de usarem de conceitos característicos do Racionalismo Moderno, como ligações do tipo *pi* e *ressonância*, em suas respostas a concepção da LC advém do Racionalismo Clássico, entendendo que as ligações, como par de elétrons compartilhados por dois centros, podem ser “feitas e desfeitas”.

Já em respostas à Q09, acerca da polaridade da molécula da água, o S4 também foi o mais recorrente, e a propriedade foi geralmente atribuída à geometria característica da molécula (angular), explicada a partir dos princípios da VSPER.

Os compromissos epistemológicos e ontológicos característicos que foram utilizados para conceber o S4, também se encontram nas revisões narrativa e sistemática que Baltieri (2020) desenvolveu e explorou. Ideias da LC a partir do compartilhamento de dois elétrons por dois centros, características da Teoria de Lewis, se encontraram documentadas nas obras analisadas pelo autor, englobadas dentro do tema epistemológico do Racionalismo Clássico. Vemos uma forte aproximação entre os compromissos e a rede de conceitos utilizados pelos estudantes em suas respostas ao Questionário e aqueles que estabilizam as categorias da segunda zona do PC da LC, *Conectividade Estabilizadora*, sobretudo a categoria *Par de elétrons*. Em ambos os casos, o compartilhamento de dois elétrons por dois centros, levando a uma completude da camada de valência, aumenta a estabilidade dos átomos, em relação ao estado em que não estão conectados de alguma forma. Com isso, podemos traçar que os compromissos característicos levantados por Baltieri (2020) para a constituição das categorias da segunda zona e aqueles que

identificamos e agrupamos a partir das respostas categorizadas com o S4, são equivalentes e, portanto, respaldados pelos três domínios genéticos analisados.

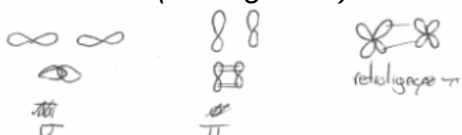
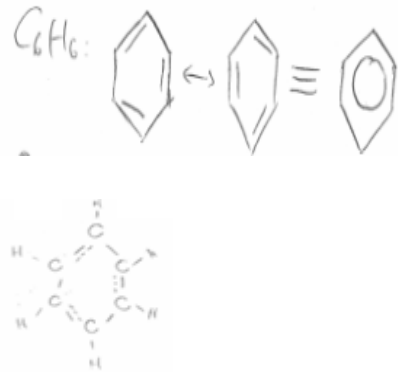
Comparando as respostas do Questionário com as de Baltieri (2020), podemos notar que o S4 surge em mais contextos e também com maior incidência em respostas analisadas na atual pesquisa. Observa-se, por exemplo, que essa maneira de conceber a LC não emergiu em respostas às questões Q01, Q07 e Q09, além de ser identificada em uma única resposta para a Q02, enquanto na pesquisa descrita nesta tese traz que S4 teve considerável frequência em todas essas Questões. Com isso, temos que o aprofundamento da exploração da emergência de concepções de estudantes em contextos de curta duração, tratados nesta etapa da pesquisa, possibilitou ampliar a identificação de compromissos característicos da LC em novos contextos. Temos, assim, que a articulação com os compromissos identificados nos demais domínios genéticos se mostra coerente e respalda a proposição de categorias e zonas do PC estabilizadas por tais compromissos.

5.1.5 Características e emergências do Quinto Significado nas respostas ao Questionário

O quinto significado (S5) identificado pode ser enunciado como “a LC é a *sobreposição de orbitais atômicos*”. Nas respostas em que emerge esse significado, a natureza da LC é explicada a partir de compromissos epistemológicos e ontológicos característicos das teorias do Racionalismo Moderno, sobretudo da TLV. Esses compromissos concebem a LC quando a sobreposição dos orbitais atômicos leva a um estado de menor energia total e, portanto, maior estabilidade. Em relação aos significados anteriores (S1 a S4), mostra uma mudança epistemológica e também ontológica da LC, concebida agora como resultado de processos de estabilização e desestabilização do sistema,

O S5 foi identificado em respostas de seis questões ao longo do Questionário. Extratos representativos de respostas para cada questão e a ocorrência do S5 nessas são mostrados no Quadro 10. Embora identificado em boa parte das questões, esse significado surge com maior frequência sobretudo nas questões Q06, Q07 e Q09, em que o contexto de aplicação é direcionado para levantar conceitos característicos de teorias e modelos da ligação modernas e contemporâneas. Quando emerge em algumas outras questões, muitas vezes ocorre pela simples verbalização de conceitos característicos dessas teorias e modelos, como “orbitais”.

Quadro 10 – Usos e ocorrências do quinto significado nas respostas ao Questionário.

Questão	Extratos representativos	Ocorrência (%)
Q01	“Uma ligação química é a sobreposição dos orbitais de valência de um elemento químico, ocorrendo o compartilhamento de elétrons ou outras formas de ligação” O11.	1 (1,3%)
Q02	“Uma ligação covalente é um tipo de ligação química que envolve a sobreposição de orbitais moleculares com átomos de eletroafinidade semelhantes (...). Tem-se dois tipos mais simples como a ligação covalente σ, o encontro dos orbitais “p” frontais. Ligação covalente π, a interação dos orbitais paralelos, e a retroligação π que é a interação dos orbitais σ^* (não-ligantes)  M05.	7 (9,2%)
Q03	-	-
Q04	“Os orbitais do cloro interagem com os orbitais do hidrogênio, proporcionando a reação” P11.	2 (2,6%)
Q05	-	-
Q06	 M01. O02.	13 (17,1%) para a molécula de C ₆ H ₆
Q07	“As ligações desta estrutura não apresentam diferenças energéticas pois, por ressonância, as cargas dos elétrons são espalhadas entre os carbonos através dos orbitais π e esta distribuição de cargas também acarreta em distâncias entre as ligações iguais” O05.	20 (26,3%)
Q08	-	-
Q09	-	-
Q10	“Teoria da hibridização” M07, “Teoria da sobreposição de orbitais atômicos” M12.	42 (55,3%)

Fonte: elaborado pelos autores.

A ligação como sobreposição de orbitais foi concebida em uma das repostas à Q01 e em sete à Q02, com destaque para a resolução do estudante M05, em que apresenta possibilidades de sobreposição frontal e lateral desses orbitais.

Em representações para a molécula de fórmula C_6H_6 , solicitada na Q06, observa-se que alguns estudantes buscaram retratar o fenômeno de ressonância e do híbrido de ressonância para as ligações com caráter intermediário entre simples e duplo entre os carbonos na estrutura do benzeno. Quando tal fenômeno foi nominalmente solicitado para ser explicado, na Q07, a incidência de estudantes que usaram desse conceito aumentou. Ainda assim, esperava-se que essa questão evocasse concepções atreladas a esse significado em maior recorrência, porém observou-se que os estudantes utilizaram da noção da LC como par de elétrons compartilhado entre dois centros, característica do S4. Novamente, podemos apontar semelhanças para os resultados apontados por Fernandes (2019), acerca da tendência de estudantes, mesmo em cursos de Ensino Superior de Química, de conceber a LC a partir da concepção característica do Racionalismo Clássico.

Vemos um forte paralelo entre o S5 identificado nas respostas ao Questionário com as categorias construídas por Baltieri (2020) da combinação de significados e compromissos que identificou na revisão narrativa e sistemática para o tema epistemológico do Racionalismo Clássico. Sobretudo, as respostas em que o S5 emerge resguardam compromissos epistemológicos e ontológicos e uma rede de conceito similares ao das categorias *Orbitais localizados* e *Processo*. Para além do entendimento da LC como a sobreposição de orbitais atômicos, temos também discussões acerca da direcionalidade e localidade da ligação, na região intranuclear, se aproximando dos compromissos característicos da categoria *Orbitais localizados*. Com relação à categoria *Processo*, temos as respostas dos estudantes que utilizam da ideia de hibridizações de orbitais como etapas da formação da LC, tida assim ontologicamente como um processo. Assim, vemos diversos paralelos podendo ser traçados entre os compromissos identificados nas diferentes fontes de dados: literatura de concepções alternativas, questionário aplicado a estudantes e da literatura da história e filosofia da Ciência. O diálogo entre as informações extraídas dessas fontes de dados possibilita estabilizar as categorias que constituem a terceira zona do PC da LC proposto por Baltieri (2020): *Remanescência Localizada*, que incluem os compromissos característicos para o S5.

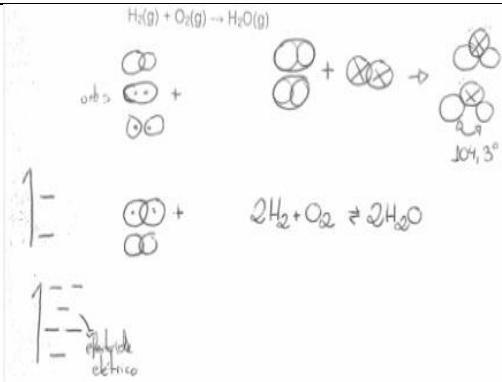
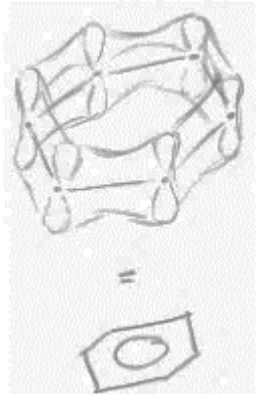
Como novas contribuições desta pesquisa, observa-se uma discrepância interessante para as respostas à Q07: enquanto todas as resoluções analisadas por Baltieri (2020) apresentaram características desse S5 para explicar propriedades da molécula de benzeno, nesta pesquisa os estudantes utilizaram uma maior pluralidade de significados para essa resolução e o S4 foi mais recorrente. Temos, assim, que a exploração que se deu, de maneira mais extensiva, do domínio microgenético nesta pesquisa traz contribuições para entender tendências e predominância de certas concepções da LC, em diferentes contextos.

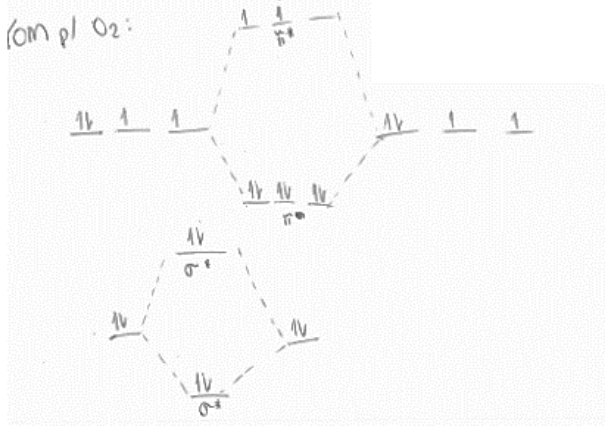
5.1.6 Características e emergências do Sexto Significado nas respostas ao Questionário

Por fim, o sexto significado (S6) identificado na análise das respostas ao Questionário pode ser enunciado como *“a LC é a formação de orbitais moleculares deslocalizados pela molécula”*. Diferentemente do que temos para o S5, nas respostas que utilizaram desse significado temos que orbitais moleculares são formados da sobreposição de orbitais atômicos e que se encontram deslocalizados por toda molécula. Temos que para as respostas em que esse significado foi identificado, se encontra a ideia de *sistema* molecular, resultado de todas as atrações e repulsões entre núcleos e elétrons de todos os átomos envolvidos. Assim, temos que, para essas respostas, as visões epistemológica e ontológica são condizentes com as teorias e modelos do Racionalismo Contemporâneo, sobretudo da TOM.

Quadro 11 - Usos e ocorrências do sexto significado nas respostas ao Questionário.

Questão	Extratos representativos	Ocorrência (%)
Q01	<i>“Interação entre as nuvens eletrônicas de dois átomos”</i> M11.	1 (1,3%)
Q02	<i>“É uma ligação onde as eletronegatividades dos átomos são semelhantes, tendo um compartilhamento das nuvens eletrônicas mais homogênea e menos distorcida dentro da molécula”</i> P19.	2 (2,6%)

Q03	 M05	1 (1,3%)
Q04	“Esta reação ocorre pois tanto o H quanto o Cl realizam uma ligação para ficarem estáveis. A troca de H por Cl no primeiro composto (metano), não altera sua estabilidade, visto que o átomo central permanece com seus orbitais preenchidos. Já a troca no segundo composto (Cl2) é estável pois tanto H quanto Cl realizam ligação iônica” N17.	1 (1,3%)
Q05	“Grupo A: 2 orbitais semipreenchidos ou 1 orbital preenchido instável na ligação. Tendem a formar carga 2+ ou 2-. Grupo B: carga 1+ ou 1-, 1 orbital semipreenchido. Grupo C: 3 orbitais semipreenchidos, fazem 3 ligações. Grupo D: 4 orbitais semipreenchidos” M05.	1 (1,3%)
Q06	-	-
Q07	“Temos a nuvem eletrônica de cada carbono que se sobrepõem formando uma nova nuvem, com um novo formato, mas a probabilidade de encontrar o elétron permanecendo. Ocorre então um efeito de ressonância de elétrons, onde o mesmo percorre todo o ciclo  ” N02.	9 (11,8%)
Q08	“A partir da teoria do orbital molecular, identifica-se elétrons desemparelhados nos orbitais π antiligantes, responsáveis pelas características magnéticas do oxigênio molecular	36 (47,4%)

	 " O08.	
Q09	"O oxigênio é o 2º elemento mais eletronegativo, logo, ligado em moléculas, ele tem a tendência de atrair elétrons para si, gerando uma carga parcial negativa sobre o átomo de oxigênio e cargas parciais positivas sobre os átomos de hidrogênio. Assim, ele distorce a nuvem eletrônica formando dipolos na molécula" O03.	11 (14,5%)
Q10	"Teoria do Orbital Molecular" O07.	59 (78%)

Fonte: elaborado pelos autores.

Nas questões Q01 a Q06, observa-se poucas emergências desse significado nas respostas dos estudantes. Em alguns casos, há uma mera verbalização de conceitos, como nuvem eletrônica e sobreposição de orbitais, sem traçar maiores relações com outros conceitos e propriedades.

Já para a Q07, observa-se o uso desse significado com uma rede de conceitos característicos do Racionalismo Contemporâneo. Como exemplo, na resposta do estudante N02 para explicar os tamanhos e forças equivalentes das ligações entre carbonos na molécula de benzeno, concebe-se a ideia de deslocalização dos elétrons por toda molécula, formando uma *nuvem eletrônica*.

O S6 foi o mais recorrente na Q08, como era esperado, para explicar o paramagnetismo característico da molécula do oxigênio molecular (O_2). Nas respostas, observa-se a associação da propriedade com a presença de elétrons desemparelhados em orbitais moleculares, com exemplos em que até mesmo a construção desses orbitais, utilizando dos princípios da CLOA, é abordada por um dos respondentes. Nessas respostas, temos que todos os elétrons dos átomos ligantes são considerados para o preenchimento dos orbitais moleculares, bem como processos de estabilização e desestabilização, evidenciados pela presença de elétrons em orbitais do tipo ligante ou antiligante.

Temos, para esse último significado atribuído à LC, importantes paralelos que podem ser estabelecidos entre os compromissos abarcados e aqueles identificados por Baltieri (2020) na exploração dos domínios ontogenético e sociocultural. A rede de conceitos e a concepção da LC como resultado de um orbital molecular deslocalizado pelo sistema molecular foram identificados dentro do tema epistemológico Racionalismo Contemporâneo. Temos que, ontologicamente, a LC é concebida como um *fenômeno*, e o sistema eletrônico da molécula pode ser analisado a partir de parâmetros energéticos, na forma de diagramas de nível de energia. Com isso, temos que o S6 se aproxima de categorias constituídas durante a proposição do PC da LC, compartilhando de compromissos em comum com as categorias *Orbitais deslocalizados* e *Ordem de ligação*, sobretudo.

Nas respostas analisadas, pudemos observar os compromissos característicos desse significado em quase todas as respostas. Para as respostas obtidas por Baltieri (2020), esses foram identificados em apenas duas questões: Q02 e Q08. Dessa maneira, entendemos que a presente pesquisa contribuiu para uma exploração do domínio microgenético de modo que mais contextos de aplicação das diferentes concepções emergiram das respostas dos estudantes. Com isso, compromissos característicos dessas concepções e como os estudantes os utilizam, em conjunto com a rede de conceitos dos temas epistemológicos que contemplam as distintas concepções.

5.1.7 Considerações gerais da análise das respostas ao Questionário

Com conclusões de nossa análise das respostas ao Questionário, tivemos diferentes significações para a LC pelos estudantes respondentes, emergindo em diferentes contextos de aplicação. Os compromissos epistemológicos e ontológicos que estabilizam esses significados encontram paralelo com aqueles levantados por Baltieri (2020) em suas revisões narrativa da história do conceito da LC e sistemática de sua conceituação. Da análise desses compromissos, pudemos realizar uma nova interação entre os domínios ontogenético, sociocultural e microgenético, a fim de estabelecer se as zonas do PC da LC e suas categorias abarcam a heterogeneidade do pensamento verbal em torno desse importante conceito.

Com esse processo de refinamento do domínio microgenético e a interação conjunta com os demais domínios explorados, podemos estabelecer que o PC da LC

se mostra agora mais bem estabelecido dentro do Programa de Pesquisas em PC. Com isso, temos nele uma importante e interessante ferramenta com potencial heurístico para análise de diferentes processos de conceituação e utilização do conceito da LC, como em discursos orais e escritos em contextos de ensino-aprendizagem de Ciências.

5.2 Análise dos livros didáticos usados em cursos de Química no Ensino Superior

A segunda questão da presente pesquisa guiou a análise de LD de cursos de Química mais utilizados nas instituições públicas de Ensino Superior do estado de São Paulo, em disciplinas que abordam aplicações das teorias da ligação química.

Visando responder essa questão, o PC da LC foi utilizado como uma ferramenta para identificar e analisar semanticamente Unidades de Registro Textuais (URT) em que emergiam diferentes significados da LC. Cada URT foi relacionada com uma zona do PC a partir dos compromissos epistemológicos e ontológicos que para conceber o conceito de LC. Em um segundo momento, buscou-se estabelecer relações de coerência e adequação entre o contexto a qual os autores buscavam explicar nas URT analisadas, a concepção de LC escolhida, a teoria-base para essa concepção e a rede de conceitos utilizada. Assim, foi possível apontar e analisar possíveis impactos, em processos de ensino-aprendizagem, das escolhas e aplicação das diferentes concepções da LC pelos autores em diferentes contextos.

Nas seções 5.2.1 a 5.2.3 e em suas subseções, os resultados para cada um dos três LD são apresentados e discutidos individualmente. Da discussão conjunta das três obras, na seção 5.2.4 são apontadas as conclusões acerca de toda a análise, a fim de se responder a segunda questão de pesquisa.

5.2.1 Resultados e discussão da obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”

A primeira obra analisada é a quinta edição de “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”, da W. H. Freeman and Company, escrita por Peter Atkins, Tina Overton, Jonathan Rourke, Mark Weller, Frases Armstrong e Michael Hageman, de 2010.

Ao longo da obra, identificamos o uso de concepções da LC relacionadas com três das zonas do PC da LC: a segunda zona, *Atratividade Estabilizadora*; a terceira zona, *Remanescência Localizada*; e a quarta zona, *Deslocalização Sistemática*. A frequência de URT em que foram identificadas as concepções características dessas zonas para introduzir ou aplicar o conceito de LC são mostradas na Tabela 2.

Tabela 2 - Frequência das zonas do PC de LC na obra "Shriver & Atkins Inorganic Chemistry".

Zona do PC da LC	Frequência de URT
Atratividade Estabilizadora	35
Remanescência Localizada	28
Deslocalização Sistemática	45
Total = 108	

Fonte: elaboração própria.

Vale citar que as primeiras emergências das concepções características para a LC surgem todas ao longo do segundo capítulo da obra, intitulado “Estrutura molecular e ligação” (tradução nossa)¹³. Nesse capítulo, os autores se propõem a apresentar as bases, fundamentos e o desenvolvimento histórico de algumas das principais teorias da ligação química e covalente, bem como uma rede de conceitos relacionada a estas, destacando-se as teorias de Lewis, TLV e TOM. Nessa parte da obra, os autores lançam mão de princípios que serão retomados e utilizados ao longo de todo o texto para explicar diferentes problemáticas e propriedades observadas em átomos e moléculas, como geometria, força de ligação e reatividade, entre outras.

5.2.1.1 A segunda zona do PC da LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”

Para as diferentes maneiras em que a LC é abordada a partir de compromissos epistemológicos e ontológicos característicos da segunda zona do PC, foram identificadas 30 URT. Os seis contextos em que essas maneiras emergem são mostrados na Tabela 3.

Tabela 3 - Usos e contextos de aplicação da segunda zona do PC da LC, na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Geometria Molecular	17
Acidez e basicidade de compostos	5
Natureza da ligação	5
Força e comprimento de ligações	5
Compostos deficiente em elétrons	2
Ligação de H	1
Total = 35	

Fonte: elaboração própria.

¹³ Molecular Structure and bonding.

Destacamos, em um primeiro momento, trechos em que a LC característica da segunda zona tem sua *natureza* e aspectos gerais de sua formação apresentados e discutidos. Foram identificados cinco URT com tal finalidade, todas no segundo capítulo, em que se concebe a LC a partir da ideia de que “cada átomo compartilha elétrons com seus átomos vizinhos para alcançar um total de oito elétrons de valência (um ‘octeto’)” (Atkins *et. al.*, 2010, p.34, tradução nossa¹⁴). Nessa concepção, é apontado que a configuração de um gás nobre, com a camada de valência completa, seria a configuração mais estável que um átomo pode alcançar, e tal é obtida quando compartilha elétrons (no caso da LC) entre dois centros, doa ou recebe (para ligações do tipo iônica). Nesse e nos demais trechos identificados, temos também a introdução de outros fundamentos inerentes a essa concepção e explicações acerca de outros conceitos correlacionados, como: ligações simples, duplas e triplas; pares de elétrons compartilhados e isolados;

Apresentadas as discussões acerca das principais características da LC como compartilhamento de dois elétrons por dois centros, ao longo da obra essa concepção foi utilizada em diferentes contextos de explicações de propriedades de moléculas e substâncias.

Como mostrado na Tabela 3, o contexto mais recorrente para essa concepção foi em explicações acerca da *geometria molecular*, com 17 URT identificadas. Em todos esses casos, foram utilizados os princípios do modelo VSEPR, com a ideia de que os pares de elétrons compartilhados entre dois centros, na forma de ligações, e também os “isolados” se repelem, de maneira a formar os vértices de figuras geométricas características. Como exemplo, temos a explicação do arranjo tetraédrico dos íons moleculares trióxido de enxofre e (SO_3^{2-}) e tetracloreto de fósforo (PCl_4^+) (Figura 7), ambos com quatro pares de elétrons de valência em torno do átomo central, porém com um par de elétrons isolados para o caso do íon molecular trióxido de enxofre (SO_3^{2-}).

¹⁴ “Each atom shares electrons with neighboring atoms to achieve a total of eight valence electrons (an ‘octet’).”

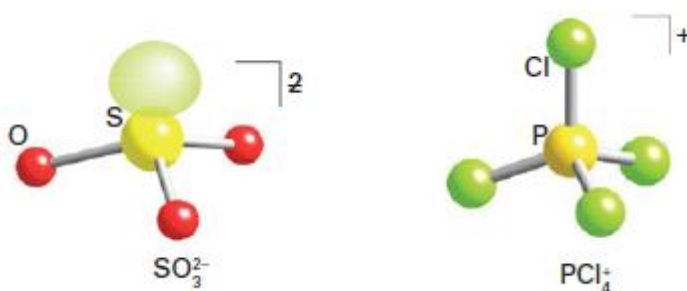


Figura 7 - Geometria tetraédrica prevista para os íons moleculares SO_3^{2-} e PCl_4^+ , por VSEPR.

Fonte: adaptado de Atkins et. al, 2010, p. 37.

Com relação a esse contexto de aplicação, entendemos que os compromissos epistemológicos e ontológicos característicos da segunda zona do PC são coerentes e suficientes para explicar a geometria das moléculas propostas na obra. As ligações, como o compartilhamento de dois elétrons por dois centros, são tratadas como uma força que mantém átomos unidos, ontologicamente entendida como um ente concreto, e a repulsão elétrica desses pares leva a geometria prevista por VSEPR.

O segundo principal contexto de aplicação da concepção de LC característica da segunda zona do PC foi em explicações acerca da *acidez e basicidade* de Lewis observada em compostos. Como exemplo, no extrato da página 132 é discutida a característica do trimetilborano ($\text{B}(\text{CH}_3)_3$) como ácido de Lewis ao aceitar um par de elétrons da amônia (NH_3) para completar seu octeto.

Uma molécula com um octeto incompleto de elétrons de valência pode completar seu octeto ao aceitar um par de elétrons. Um ótimo exemplo é o $\text{B}(\text{CH}_3)_3$, que pode aceitar o par de elétrons isolado do NH_3 e de outros doadores. Assim, $\text{B}(\text{CH}_3)_3$ é um ácido de Lewis (Atkins et. al., 2010, p. 132, tradução nossa.¹⁵).

Nessas cinco URT, a LC é concebida como um ente concreto, que pode ser “aceita” ou “doada”, de modo a completar o octeto de um átomo. A natureza da acidez ou basicidade relativa a um composto se relaciona com estabilidade alcançada a partir da completude da camada de valência, compartilhando assim da visão epistemológica característica da teoria de Lewis. Temos, assim, o uso dessa concepção nos trechos observados se mostrou coerente para o fim que se valiam, possibilitando explicações

¹⁵ A molecule with an incomplete octet of valence electrons can complete its octet by accepting an electron pair. A prime example is $\text{B}(\text{CH}_3)_3$, which can accept the lone pair of NH_3 and other donors. Hence, $\text{B}(\text{CH}_3)_3$ is a Lewis acid.

acerca do tema com uma rede de conceitos em acordo com os compromissos epistemológicos e ontológicos inerentes a concepção.

Em um desses trechos observamos que a acidez de Lewis de um composto é explicada a partir da concepção da LC como compartilhamento de elétrons, porém são utilizados conceitos oriundos de teorias quânticas da ligação química: os subníveis energéticos.

A característica mais marcante dos elementos mais leves do Grupo 13 é sua configuração eletrônica ns^2np^1 , que contribui com um máximo de seis elétrons na camada de valência quando três ligações covalentes são formadas por compartilhamento de elétrons. Como resultado, muitos dos seus compostos têm um octeto incompleto e atuam como ácidos de Lewis, podendo completar seu octeto aceitando um par de elétrons de um doador (Atkins *et. al.*, 2010, p. 327, tradução nossa¹⁶).

Nesse trecho, temos uma combinação de conceitos advindos de teorias que concebem a LC de maneiras epistemológica e ontologicamente distintas. A própria natureza do elétron difere a depender da teoria adotada como referencial: a partir da concepção da LC como compartilhamento de dois elétrons por dois centros, estes são concebidos como partículas; já quando são distribuídos em subníveis energéticos, considera sua natureza dual onda-partícula. Com isso, entendemos que trechos assim podem contribuir na constituição de obstáculos ao processo ensino-aprendizagem do conceito e das especificidades das diferentes concepções possíveis para a LC.

Para contextos em que explica-se a *força e comprimento da ligação*, foram identificados também cinco URT em que os autores utilizam da concepção da LC da segunda zona do PC. Agrupamos essas duas características em uma mesma categoria por observarmos, em muitos dos trechos nesta e nas demais obras analisadas, uma íntima relação entre elas, sendo analisadas em conjunto em muitos desses casos: ligações mais fortes (maior BDE) são relacionadas com comprimentos menores de ligação. Um ótimo exemplo das relações entre essas características é encontrado na obra de Atkins *et. al.* (2009, p. 353, tradução nossa¹⁷):

¹⁶ Most striking feature of the lighter Group 13 elements is their ns^2np^1 electron configuration, which contributes up to a maximum of six electrons in the valence shell when three covalent bonds are formed by electron sharing. As a result, many of their compounds have an incomplete octet and act as Lewis acids, being able to complete their octet by accepting a pair of electrons from a donor.

¹⁷ It should be noted that the bond in CO is short and strong (bond enthalpy 1076 kJ.mol^{-1}) and its force constant is high. These features are in accord with its possession of a triple bond, as in the Lewis structure $\text{:C} \equiv \text{O:}$. Carbon dioxide, CO_2 , shows a number of significant differences from carbon monoxide. The bonds are longer and the stretching force constants smaller in CO_2 than in CO, which is consistent with the bond being double rather than triple.

Deve ser notado que a ligação no CO é curta e forte (entalpia de ligação 1076 kJ.mol⁻¹) e sua constante de força é alta. Essas características estão de acordo com a posse de uma ligação tripla, como na estrutura de Lewis :C $\equiv$ O:. O dióxido de carbono, CO₂, apresenta uma série de diferenças significativas em relação ao monóxido de carbono. As ligações são mais longas e as constantes de força de estiramento são menores no CO₂ do que no CO, o que é consistente com o fato de a ligação ser dupla em vez de tripla.

Nesse trecho, tem-se a LC é concebida como o compartilhamento de dois elétrons por dois centros, em um contexto que busca elucidar diferenças em observações empíricas para entalpia e comprimento de ligação nos compostos de monóxido de carbono (CO) e dióxido de carbono (CO₂). Nessa explicação, são apresentadas relações intrínsecas entre a força e o comprimento de ligações.

Em um outra URT dentro desse contexto, no entanto, identificamos uma combinação de conceitos entre concepções da segunda e terceira zona, transcrito abaixo:

A fraqueza relativa nas ligações simples entre átomos do segundo período é frequentemente atribuída a proximidade dos pares isolados em átomos vizinhos e a repulsão entre eles (...). Átomos menores formam ligações mais fortes porque os elétrons compartilhados estão mais perto do núcleo atômico. A força da ligação Si – Cl é atribuída ao fato de que os orbitais atômicos dos dois elementos têm energias similares e sobreposição eficiente (Atkins *et. al.*, 2010, p. 266, tradução nossa¹⁸).

Nessa URT, a presença de pares de elétrons compartilhados e isolados é utilizada para explicar a força da ligação, em uma ideia que se aproxima da concepção de LC da segunda zona. No entanto, no mesmo trecho os autores lançam mão de ideias acerca da sobreposição eficiente de orbitais atômicos para explicar a força relativa da ligação. Apesar de ambas as zonas poderem ser utilizadas para o fim proposto, seus usos requerem individualidades próprias do contexto em que são aplicados. Entendemos que o uso indiscriminado de ideias e conceitos ontológica e epistemologicamente distintos podem se constituir como obstáculos ao aprendizado, pelos estudantes, dessas individualidades e dos fundamentos que estabilizam essas concepções.

A LC característica da segunda zona foi utilizada para explicar a existência de *compostos deficientes em elétrons* em duas URT, como no trecho em que é proposta uma explicação para a estrutura da molécula do diborano (B₂H₆).

¹⁸ The relative weakness of single bonds between atoms of Period 2 elements is often ascribed to the proximity of the lone pairs on neighbouring atoms and the repulsion between them (...). Smaller atoms form stronger bonds because the shared electrons are closer to each of the atomic nuclei. The strength of the Si – Cl bond is attributed to the fact that the atomic orbitals of the two elements have similar energies and efficient overlap.

Uma estrutura de Lewis para o diborano, B_2H_6 , exigiria pelo menos 14 elétrons de valência para ligar os oito átomos juntos, mas a molécula tem apenas 12 elétrons de valência. A explicação simples dessa estrutura é a presença de ligações de três-centros, dois elétrons BHB, atuando como ponte entre os dois átomos de B, então dois elétrons contribuem para a ligação de três átomos (Atkins *et. al.*, 2010, p. 283 e 284, tradução nossa¹⁹).

Como apontado pelos próprios autores no trecho, essa explicação é mais simples e, em alguns casos, limitada. Para o caso do diborano, no entanto, se mostra válida e usa de conceitos e compromissos que estão de acordo com a concepção da LC como compartilhamento de elétrons, porém com a indicação da possibilidade desse compartilhamento de da de maneira distinta do que é classicamente concebido pela teoria de Lewis: em compostos como o diborano, observamos a possibilidade do compartilhamento de dois elétrons entre *três* centros (3c,2e).

Por fim, em uma URT foi identificada as características da segunda zona do PC da LC em explicações acerca da *ligação de hidrogênio*. Nesse trecho, transcrito abaixo, a diferença de eletronegatividade entre átomos e a existência de um par de elétrons de valência não-compartilhados ao redor átomo central são usados para explicar essa propriedade em alguns compostos. Entendemos que a rede de conceito e os compromissos utilizados pelos autores condizem com a teoria-base e a concepção de LC característica da segunda zona do PC da LC.

Uma ligação E – H entre um elemento eletronegativo E e hidrogênio é altamente polar (...) e o H parcialmente carregado positivamente pode interagir com um par isolado do átomo E de outra molécula, formando uma ponte conhecida como ligação de hidrogênio (Atkins *et. al.*, 2010, p. 284, tradução nossa²⁰)

Nessa URT, temos a LC concebida a partir de compromissos epistemológicos característicos da teoria de Lewis e ontológicos como um ente concreto, com propriedades derivadas de características dos átomos que se ligam, como a eletronegatividade destes. Assim, a ligação pode ser mais ou menos polar em decorrência dessas propriedades atômicas e isso pode explicar fenômenos relacionados ao composto como um todo, resultante da interação entre moléculas.

¹⁹ A Lewis structure for diborane, B_2H_6 , would require at least 14 valence electrons to bind the eight atoms together, but the molecule has only 12 valence electrons. The simple explanation of its structure is the presence of BHB three-centre, two-electron bonds acting as bridges between the two B atoms, so two electrons contribute to binding three atoms.

²⁰ An E – H bond between an electronegative element E and hydrogen is highly polar, (...) and the partially positively charged H atom can interact with a lone pair on the E atom of another molecule, forming a bridge that is known as a hydrogen bond.

Para as URT identificadas a partir da concepção da LC característica da segunda zona, pudemos observar e discutir seu uso em diferentes contextos, a partir dos compromissos epistemológicos e ontológicos e a rede de conceitos relacionada ao conceito. De uma maneira geral, observamos concordância entre esses compromissos e conceitos e aqueles que estabilizam a segunda zona do PC. Em alguns poucos casos, observa-se uma combinação entre conceitos “importados” de zonas distintas, o que pode constituir obstáculos ao ensino, sobretudo na compreensão da multiplicidade de significados em torno do conceito da LC e suas especificidades.

5.2.1.2 A terceira zona do PC da LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”

Para as maneiras de se falar acerca da LC características da terceira zona do PC da LC, tivemos ao todo 28 trechos em que foram explicadas ou aplicadas para explicar fenômenos. Esses contextos e suas ocorrências são mostradas na Tabela 4.

Tabela 4 - Usos e contextos de aplicação da terceira zona do PC da LC, na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Geometria molecular	8
Força e comprimento de ligações	7
Natureza da ligação	4
Hipervalência	3
Acidez e basicidade de compostos	3
Compostos deficientes em elétrons	3
Total = 28	

Fonte: elaboração própria.

Novamente, começaremos discutindo os contextos em que os fundamentos que explicam a *natureza da LC*, na concepção característica da terceira zona, foram introduzidos. As quatro URT com essa finalidade são apresentadas no Capítulo 2 da obra, ao discutir as bases da TLV, seu desenvolvimento histórico e os compromissos epistemológicos e ontológicos da LC como a *sobreposição de orbitais atômicos*.

Nessas discussões, os autores apresentam a representação matemática da ligação como a função de onda resultante da sobreposição (ou combinação linear) das funções de onda dos orbitais atômicos. Essa concepção resguarda a natureza dual (onda-partícula) do elétron, um rompimento com a concepção anterior. A função

de onda que representa o estado de menor energia potencial da molécula e, portanto, o mais estável, resulta das funções de ondas dos orbitais atômicos quando há interferência construtiva entre elas. A natureza da ligação advém da alta probabilidade de se encontrar o par de elétrons compartilhados entre os dois núcleos na região intranuclear, quando as interferências são construtivas. Como exemplo, temos o trecho que explica a formação da ligação σ para o hidrogênio molecular (H_2):

A formação da ligação pode ser imaginada como sendo devida à alta probabilidade de que os dois elétrons sejam encontrados entre os dois núcleos e, portanto, serão mantidos unidos. (...) nas interferências construtivas (...) há um aumento na amplitude da função de onda na região internuclear (...). Dizemos, portanto, que uma função de onda pela TLV é formada pelo emparelhamento de spin dos elétrons nos dois orbitais atômicos contribuintes (Atkins *et. al.*, 2010, p. 39, tradução nossa²¹).

Assim, nos demais contextos em que essa concepção de LC é utilizada para explicar fenômenos e propriedades de moléculas e compostos, os compromissos epistemológicos e ontológicos da LC derivam desses fundamentos e são relacionados com uma rede de conceitos como: ressonância; hibridização de orbitais; ligações direcionalizadas σ e π ; entre outros.

Assim como para a segunda zona, o uso mais recorrente identificado para a concepção característica da terceira foi em contextos de discussão acerca da *geometria molecular*, com oito ocorrências ao longo da obra. Nessas URT, a explicação advém do processo de *hibridização* dos orbitais atômicos sobrepostos, como para a molécula de metano (CH_4):

Uma molécula de CH_4 é consistente com uma forma tetraédrica com quatro ligações C – H equivalentes. Cada orbital híbrido do átomo de carbono promovido contém um único elétron desemparelhado; um elétron em 1s do H pode parar com cada um deles, levando a formação de uma ligação σ apontando em uma direção de um tetraedro (Atkins *et. al.*, 2010, p. 42, tradução nossa.²²)

Nesse trecho, é possível observar importantes diferenças na concepção da LC, quando comparada a concepção característica da segunda zona, nas explicações

²¹ The formation of the bond can be pictured as being due to the high probability that the two electrons will be found between the two nuclei and hence will bind them together (...). interferes constructively (...) there is an enhancement in the amplitude of the wavefunction in the internuclear region (...). We say, therefore, that a VB wavefunction is formed by spin pairing of the electrons in the two contributing atomic orbitals.

²² A CH_4 molecule is consistent with a tetrahedral shape with four equivalent C – H bonds. Each hybrid orbital of the promoted carbon atom contains a single unpaired electron; an electron in H1s can pair with each one, giving rise to a σ bond pointing in a tetrahedral direction.

acerca da geometria molecular. Como discutido, os contextos em que a LC é tida como compartilhamento de elétrons, a geometria é explicada a partir da repulsão de pares de elétrons em torno do átomo central, pelo modelo de VSPER e utilizando das estruturas de Lewis para representar moléculas. Já para URT da terceira zona do PC da LC, esta é tida como resultado de um *processo*, resultado da formação de orbitais hibridizados, marcando uma diferença epistemológica, mas também ontológica de como a LC é concebida. Essa diferenciação se mostra explicitada nos trechos analisados, o que entendemos que se constitui como uma importante estratégia para que alunos e professores possam verificar que, com suas limitações e especificidades, ambas podem ser usadas para explicar contextos similares.

Como segundo contexto principal de aplicação da concepção de LC característica da terceira zona, temos que explicações acerca de *força e comprimento da ligação* foram identificadas em sete URT. Em geral, a concepção da LC é associada aos processos de hibridização e/ou da ressonância para explicar os valores experimentais, como o tamanho e força equivalentes das ligações C – H do metano: “por cada orbital híbrido sp^3 ter a mesma composição, todas as quatro ligações σ são idênticas com exceção de suas orientações espaciais” (Atkins *et. al.*, 2010, p. 42, tradução nossa²³).

Nesse e nos demais trechos analisados, os conceitos utilizados e os compromissos epistemológicos e ontológicos que estabilizam a concepção da LC são característicos da terceira zona do PC. Também observa-se uma mudança na epistemologia e ontologia do conceito, quando comparado com os trechos em que a força e o comprimento de ligações são explicadas a partir da concepção da LC como par de elétrons compartilhado. Para os trechos característicos da segunda zona, a força característica da ligação é explicada a partir de estruturas que se atraem ou repelem, em uma ontologia do par de elétrons como um ente material e prevalecendo uma concepção realista. Já para as URT identificadas para a terceira zona, a formação de orbitais híbridos é o que possibilita atingir um *sistema* de ligações favoráveis, concebendo assim a ligação como resultado de um *processo* de várias etapas.

Para os três casos em que os fundamentos relacionados com a terceira zona do PC da LC são utilizados para explicar a *hipervalência* em alguns compostos, os

²³ Because each sp^3 hybrid orbital has the same composition, all four σ bonds are identical apart from their orientation in space.

autores usam da possibilidade do uso de orbitais *d* para a formação de ligações entre átomos. Como exemplo, destacamos o trecho: “um átomo de P pode acomodar mais de oito elétrons se usar seus orbitais vazios *3d*. No pentacloreto de fósforo (PCl_5), com seus cinco pares de elétrons ligantes, ao menos um orbital *3d* deve ser usado em conjunto aos quatro orbitais *3s* e *3p* da camada de valência ” (Atkins *et. al.*, 2010, p. 41, tradução nossa²⁴).

Em três URT, observou-se a explicação de casos de *compostos deficientes em elétrons* a partir de concepções da LC como resultado de processos de hibridização, como para o caso de boranos:

Em boranos mais complexos, os três centros das ligações *3c,2e* podem ser pontes BHB, mas também podem ser ligações as quais três átomos de B residem nos vértices de um triângulo equilátero com os orbitais híbridos sp^3 sobrepostos em seu centro ” (Atkins *et. al.*, 2010, p. 338, tradução nossa²⁵).

Nesse trecho, é possível destacar uma comparação entre explicações para a existência de compostos deficientes em elétrons a partir de diferentes concepções da própria ligação. A formação de centros do tipo com 3 centros ligados por 2 elétrons (*3c,2e*) se aproxima da LC como compartilhamento de elétrons, e se mostra como uma possibilidade para explicar esses compostos. No mesmo trecho, os autores também trazem uma explicação que se baseia em uma visão derivada do racionalismo moderno, com a LC como sobreposição de orbitais. Entendemos que comparações desse tipo podem enriquecer o processo de ensino-aprendizagem do conceito de LC e de seus diferentes significados, uma vez que exemplifica possibilidades, limites e especificidades de aplicação de teorias com concepções distintas. Como apontado por Mortimer e Amaral (2014), LD que tendem a priorizar um único significado dentre os demais podem levar a uma carência na compreensão da multiplicidade de concepções de um conceito. Isso pode levar a uma compreensão, por seus leitores, de que determinadas teorias e visões são únicas e corretas. No trecho em destaque, podemos apontar que existe o movimento contrário, ao explorar diferentes possibilidades de explicações para um mesmo contexto, a partir de visões epistemológicas distintas.

²⁴ A P atom can accommodate more than eight electrons if it uses its vacant *3d* orbitals. In PCl_5 , with its five pairs of bonding electrons, at least one *3d* orbital must be used in addition to the four *3s* and *3p* orbitals of the valence shell.

²⁵ In the more complex boranes, the three centres of the *3c,2e* bonds may be BHB bridge bonds, but they may also be bonds in which three B atoms lie at the corners of an equilateral triangle with their sp^3 hybrid orbitals overlapping at its centre.

Por fim, temos a *acidez e basicidade de compostos* sendo explicados, em três URT, a partir de conceitos relacionados com a terceira zona do PC da LC, sobretudo com a possibilidade de doação de par de elétrons para orbitais hibridizados vazios:

Uma ligação σ é formada quando um par de elétrons isolado de um íon haleto, agindo como uma base de Lewis, é doado para um orbital híbrido sp^3 vazio do átomo de Be (Atkins *et. al.*, 2010, p. 133, tradução nossa²⁶).

Nesse trecho, observa-se uma combinação indiscriminada entre conceitos e compromissos característicos da segunda e da terceira zona do PC da LC. A ligação é, em si, concebida a partir de um par de elétrons que pode ser *doador* e *receptor*, em uma visão realista e materialista do conceito. No entanto, é explicada em conjunto com conceitos advindos de uma concepção racionalista da ligação, explicitada por termos como “ligação σ ” e “orbital híbrido”. A combinação desses conceitos pode se edificar como obstáculos de aprendizagem por estudantes, ao tomarem contato com o material. O uso de *orbital* em conjunto com conceitos que não fazem sentido dentro de uma abordagem quântica para a formação de ligações foi apontado por Rozentalski (2013) e Autschbach (2012) como uma fonte de obstáculos ao ensino da LC e das teorias da ligação química. Ainda, temos que essa combinação pode impactar em dificuldades de distinguir a LC para além do compartilhamento de elétrons, mesmo em situações em que tal definição não condiz com os compromissos epistemológicos e ontológicos adotados, como em processos de sobreposição de orbitais atômicos e ressonância.

5.2.1.3 A quarta zona do PC da LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”

Por fim, discutimos as URT em que a LC é concebida a partir de compromissos epistemológicos e ontológicos característicos da quarta zona do PC, denominada *Deslocalização sistemática*. Ao todo, foram identificados 45 URT em que essa forma de se abordar a LC é concebida, em contextos e frequências mostrados na Tabela 5.

Tabela 5 - Usos e contextos de aplicação da quarta zona do PC da LC, na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Força e comprimento de ligações	20

²⁶ A σ bond is formed when a lone pair of electrons of a halide ion, acting as a Lewis base, is donated into an empty sp^3 hybrid orbital on the Be atom.

Geometria molecular	6
Natureza da ligação	5
Acidez e basicidade de compostos	5
Cor em compostos	3
Hipervalência	2
Polaridade	2
Paramagnetismo/diamagnetismo	1
Condutividade elétrica	1
Total = 45	

Fonte: elaboração própria.

Para as discussões acerca da natureza da LC, a partir de compromissos característicos da quarta zona do PC, temos que em cinco URT são apresentados os fundamentos principais dessa concepção a partir da TOM, no segundo capítulo da obra. Nesses fundamentos, não é explicitada uma concepção direta do que é a ligação, uma vez que a molécula é considerada em sua totalidade, não passível de ser analisada a partir de seus componentes atômicos isolados. No entanto, a ideia principal para definir se há ou não a formação de uma molécula reside na *deslocalização* de um orbital molecular por toda molécula, sendo este uma região com alta probabilidade de se encontrar elétrons. Os orbitais moleculares são construídos a partir da sobreposição de orbitais atômicos, levando em conta os princípios da CLOA e parâmetros energéticos dos orbitais. A ocorrência ou não de uma ligação é associada com o preenchimento, por elétrons, de orbitais ligantes, com nível energético abaixo dos orbitais dos átomos quando separados, e antiligantes, com nível energético acima. Assim, o sistema molecular se mostra estável quando elétrons ocupam mais orbitais ligantes que antiligantes, diminuindo a energia do sistema quando comparado com os átomos separados. A partir dos fundamentos da TOM e sua importância histórica apresentada, os autores aplicam a concepção de LC derivada em outros contextos ao longo da obra.

A maior frequência de uso para essa concepção reside em contextos acerca da *força e comprimento da ligação*, sendo observados em 20 URT. Nesses contextos, considera-se a ordem de ligação calculada para uma molécula a partir da construção dos diagramas de níveis de energia dos orbitais moleculares. Uma ordem de ligação maior é relacionada com a diminuição do comprimento e com o aumento da entalpia da ligação. Como exemplo, tem-se a comparação entre a força e tamanho das ligações na molécula tetraóxido de dinitrogênio (N_2O_4) e no íon molecular oxalato ($\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$).

A ligação N – N no N_2O_4 ser longa e fraca advém do orbital molecular ocupado pelo elétron desemparelhado é deslocalizado quase que inteiramente sobre todos os três átomos em NO_2 ao invés de estar concentrado no átomo de N. Essa estrutura contrasta com o íon isoeletrônico oxalato, $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$, em que a ligação C – C é mais forte porque em CO^{2-} o elétron é mais concentrado no átomo de C (Atkins *et. al.*, 2010, p. 389, tradução nossa²⁷).

Nesse trecho, destaca-se a concepção de uma ligação deslocalizada por todo o sistema molecular, uma mudança epistemológica quando comparada com as abordagens que os autores trouxeram para as concepções da segunda e terceira zona. Enquanto nos trechos identificados para a segunda zona a ligação era tida como um compartilhamento de elétrons entre átomos, para os trechos da terceira a concepção era da ligação localizada entre os núcleos atômicos. Essa mudança possibilita novas discussões acerca do sistema molecular, como efeitos da concentração dos elétrons deslocalizados em determinada região da molécula, apontado no trecho transcrito.

Em seis URT, a *geometria molecular* foi explicada a partir dos princípios do Diagrama de Walsh, em que se correlaciona a energia em orbitais moleculares ocupados em uma molécula e os ângulo de ligação. Nessas explicações, considera-se a ligação a partir da deslocalização de elétrons pelas moléculas e as simetrias possíveis para os orbitais ocupados, desde os de menor até os de maior energia. Novamente, temos uma mudança epistemológica e ontológica em comparação com as concepções da segunda e terceira zona: a molécula e sua geometria característica são analisadas no sistema como um todo e a partir de parâmetros energéticos, e não por efeitos de atração/repulsão de pares eletrônicos (segunda zona) ou formação de orbitais híbridos (terceira zona).

A *acidez e basicidade em compostos* foram explicados em cinco URT ao longo da obra a partir da interação entre orbitais moleculares desocupado de menor energia e ocupado de maior energia (do inglês LUMO²⁸ e HOMO²⁹, respectivamente) das espécies que reagem. Como exemplo, os autores comparam a acidez de Lewis relativa entre ésteres e haletos de borato:

²⁷ The N - N bond in N_2O_4 being long and weak and arises because the molecular orbital occupied by the unpaired electron is spread almost equally over all three atoms in NO_2 rather than being concentrated on the N atom. This structure is in contrast to the isoelectronic oxalate ion, $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$, where the C – C bond is stronger because in CO^{2-} the electron is more concentrated on the C atom.

²⁸ Lowest Unoccupied Molecular Orbital.

²⁹ (Highest Occupied Molecular Orbital).

Ésteres borato são ácidos de Lewis muito mais fracos que trihaletos de boro, presumivelmente porque o átomo de O age como um doador π intramolecular (...) e doa densidade eletrônica para o orbital p do átomo de B (Atkins *et. al.*, 2010, p. 335, tradução nossa³⁰).

Nessas URT, apesar de termos como “doar” e “receber” podem, em um primeiro momento, serem associados a ideias realistas da ligação, é interessante notar que os autores destacam a *densidade eletrônica* sendo “transferida” entre orbitais. Tendo em vista que na definição original de ácido e base de Lewis temos que bases doam pares de elétrons e ácidos aceitam, a simples transposição dessas ideias para a TOM poderia se constituir como um obstáculo epistemológico, uma vez que as concepções da ligação são distintas nessas definições.

Três URT da obra tinham como escopo explicar a *cor em compostos* covalentes, em todas a partir de conceitos relacionados com a concepção da LC característica da quarta zona do PC. Nesses trechos, a coloração característica de compostos reside na possibilidade de transição de elétrons entre orbitais HOMO e LUMO, como no trecho em que explica a cor em gases halogênicos:

Entre as propriedades físicas mais marcantes dos halogênios estão suas cores. No vapor eles variam do quase incolor F_2 , passando pelo amarelo-esverdeado Cl_2 e vermelho-marrom Br_2 vermelho-marrom, até o roxo I_2 . A progressão da absorção máxima para uma absorção de comprimento de onda mais longo refletem a diminuição na lacuna HOMO-LUMO ao descer pelo grupo. Em cada caso, o espectro de absorção óptica surge principalmente de transições nas quais um elétron é promovido dos orbitais de maior energia preenchidos $2\sigma_B$ e $1\pi_B$ para o orbital antiligante não-preenchido $2\sigma_u$ (Atkins *et. al.*, 2010, p. 425, tradução nossa³¹).

Em dois casos, a hipervalência observada em algumas moléculas é atribuída pela disponibilidade de orbitais moleculares possíveis de serem preenchidos. Em comparação com as explicações trazidas para a concepção de LC a partir da terceira zona do perfil, verifica-se que nessas os autores buscam destacar que não há a necessidade de invocar o uso de orbitais *d* em hibridização com orbitais *s* e *p*. Para o caso da molécula de hexafluoreto de enxofre (SF_6), por exemplo, essas diferenças

³⁰ Borate esters are much weaker Lewis acids than the boron trihalides, presumably because the O atom acts as an intramolecular π donor (...) and donates electron density to the p orbital of the B atom.

³¹ Among the most striking physical properties of the halogens are their colours. In the vapour they range from the almost colourless F_2 , through yellow–green Cl_2 and red–brown Br_2 , to purple I_2 . The progression of the maximum absorption to longer wavelengths reflects the decrease in the HOMO–LUMO gap on descending the group. In each case, the optical absorption spectrum arises primarily from transitions in which an electron is promoted from the highest filled $2\sigma_B$ and $1\pi_B$ orbitals into the vacant antibonding $2\sigma_u$ orbital.

são explicitadas, a partir da comparação entre os tratamentos a partir da TLV e da TOM:

A teoria dos orbitais moleculares, portanto, explica a formação do SF_6 , com quatro orbitais ligantes e dois orbitais não ligantes ocupados e não precisa invocar orbitais 3d do S e expansão do octeto. Isso não significa que os orbitais d não possam participar da ligação, mas mostra que eles não são *necessários* para ligar seis átomos de F ao átomo central S (Atkins *et. al.*, 2010, p. 54, tradução nossa³²).

Nesse trecho, é possível observar que os autores se propõem a comparar e salientar diferentes possibilidades de se explicar o fenômeno da hipervalência, a partir de diferentes concepções da LC. A expansão do octeto traz uma possibilidade a partir da concepção característica da segunda zona, o uso de orbitais hibridizados, da terceira zona, e por fim, a partir da TOM por meio de deslocalização de elétrons por orbitais ligantes e não ligantes. Com isso, temos uma abordagem que considera a multiplicidade de significados em torno do conceito e suas possíveis aplicações, uma interessante estratégia para um ensino mais plural e multifacetado.

Em duas URT, a *polaridade* de compostos, como do HF, é explicada a partir de compromissos e rede de conceitos característicos da quarta zona. Para o caso do fluoreto de hidrogênio (HF), a construção de diagramas de níveis de energia, a partir dos princípios da CLOA, possibilita atribuir a polaridade a uma maior contribuição para os orbitais atômicos que são ocupados na molécula advindos do átomo de flúor (F), como pode ser observado na Figura 8. Com isso, há uma maior densidade de carga negativa próxima do átomo de F, como é observado experimentalmente e que constata com a polaridade na molécula.

Para um único caso, foram explicadas as propriedades de *paramagnetismo/diamagnetismo* a partir de compromissos associados com a quarta zona do PC da LC. Nesse caso, o paramagnetismo do oxigênio molecular (O_2) é explicado a partir de seus diagramas de níveis de energia, com “os dois elétrons mais externos ocupando diferentes orbitais antiligantes π^* com spins paralelos” (Atkins *et. al.*, 2010, p. 403, tradução nossa³³).

³² Molecular orbital theory, therefore, accounts for the formation of SF_6 , with four bonding orbitals and two nonbonding orbitals occupied and does not need to invoke S3d orbitals and octet expansion. This does not mean that d orbitals cannot participate in the bonding, but it does show that they are not *necessary* for bonding six F atoms to the central S atom.

³³ The outermost two electrons occupy different antibonding π^* orbitals with parallel spins.

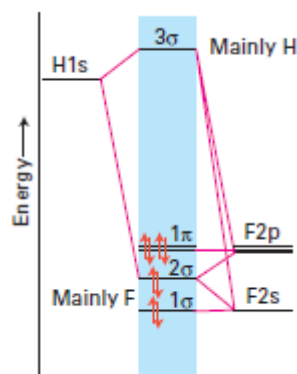


Figura 8 – Diagrama de níveis de energia do orbital molecular para a molécula de fluoreto de hidrogênio (HF).

Fonte: Atkins *et. al.* (2010, p. 49).

Por fim, em uma URT a *condutividade elétrica* de um composto (o grafite) é explicada a partir das ligações π deslocalizadas pela sua estrutura.

De modo geral, vemos uma concordância entre os compromissos utilizados durante as explicações que envolvem a concepção de LC característica da quarta zona do PC e aqueles que constituem essa zona. Nos contextos em que é aplicada, o sistema molecular é considerado como um todo, o que condiz com a ontologia e epistemologia característica dessa zona, e a rede de conceitos também se mostra coerente, usando termos que advém, sobretudo, da TOM.

Uma exceção foi identificada, durante a descrição a partir da CLOA, em que os autores apontam que “dois dos oito elétrons de valência *entram* no orbital 2σ , formando uma ligação entre os dois átomos” (Atkins *et. al.*, 2010, p. 49, grifo nosso, tradução nossa³⁴). Nesse trecho, entendemos que os compromissos utilizados, de elétrons *entrando* em orbitais para formar ligações, indicam uma ideia da LC em uma perspectiva mais próxima do realismo. Como apontado por Mortimer e Amaral (2014), em processos de ensino-aprendizagem que envolvem conceitos de ligação é comum o apelo a ideias realistas de ligação, mesmo para conceitos abstratos como orbitais e nuvem eletrônica. Assim, entendemos que trechos como o destacado podem contribuir para a constituição de obstáculos realistas por estudantes ao tomarem contato com o material.

Interessante notar que os autores tiveram uma preocupação em explicar que, em discussões que envolvem a formação de orbital molecular, é possível trazer

³⁴ Two of the eight valence electrons enter the 2σ orbital, forming a bond between the two atoms.

descrições da ligação *localizada*. Tal aproximação é justificada pelos autores pelo fato de “a descrição do orbital molecular ser matematicamente quase equivalente a uma descrição localizada da distribuição eletrônica geral” (Atkins *et. al.*, 2010, p. 54 e 55, tradução nossa³⁵). Isto é notoriamente importante para discussões que tratam da *hibridização* de orbitais, uma vez que tal conceito provém da TLV, porém é comumente utilizado em descrições qualitativas simples de orbital molecular. Essa especificação possibilita, por exemplo, o uso de orbitais híbridos na construção de orbitais “localizados” e com direção específica, como forma de analisar “regiões” da molécula. Como discutiremos em outras obras, a falta dessa especificação e uso indiscriminados do uso de orbitais híbridos dentro de concepções em que a molécula é considerada em sua integridade, pode trazer obstáculos epistemológicos ao ensino da LC.

5.2.1.4 Considerações gerais acerca do uso de diferentes concepções para a LC na obra “Shriver & Atkins Inorganic Chemistry”

Na análise do livro, foi possível identificar quais concepções de LC os autores levantaram ao longo da obra, para quais fins se usaram destas e inferir possíveis tendências no uso de determinadas zonas em detrimento de outras. A concepção característica da quarta zona do PC foi a mais recorrente, com 45 URT identificadas, além de ser usada em um número maior de contextos de aplicações (nove). A concepção relacionada com a segunda zona emergiu em seis contextos, com 35 URT em que foi concebida para explicar fenômenos e constatações empíricas. Já concepção da LC a partir da terceira zona do PC também foi observada ao longo de seis contextos diferentes, totalizando 28 URT. Não identificamos elementos característicos da primeira zona do PC da LC nas explicações ao longo desse livro.

Em um primeiro momento, sobretudo pela alta incidência de concepções relativas à quarta zona e a ausência de concepções da primeira, podemos apontar que os autores do livro centraram suas explicações a partir de teorias bem estabelecidas dentro da comunidade científica contemporânea, sobretudo racionalistas. Tendo em vista o público-alvo ao qual se destina (graduandos de cursos de Química), vemos como adequada a utilização mais recorrente de concepções derivadas dessas teorias, uma vez que introduzem ao leitor seus fundamentos e contextos de aplicação para experimentar suas possibilidades, limites e

³⁵ The molecular orbital description is mathematically almost equivalent to a localized description of the overall electron distribution.

especificidades. A segunda zona foi mais recorrente do que a terceira ao longo da obra, o que, em um primeiro momento, parece apontar para uma tendência, verificada por Fernandes (2019) em conceber a LC a partir das teorias do Racionalismo Clássico, sobretudo como o compartilhamento de dois elétrons por dois centros. No entanto, também se observa que a segunda é usada, na maior parte dos casos, para uma finalidade em específico: discutir e prever, partir da VSEPR geometria de moléculas. Assim, entendemos que a tendência apontada não se consolida nessa obra, e temos que apresenta uma multiplicidade de entradas para o uso de diferentes significados em torno do conceito

Podemos apontar alguns possíveis obstáculos ao ensino da LC que residem no uso indiscriminado de conceitos característicos de diferentes teorias da ligação, que concebem a LC a partir de compromissos epistemológicos e ontológicos distintos. Muitos desses obstáculos se encontram documentados na literatura de CA de estudantes, e sua disseminação indiscriminada em LD pode ser uma fonte para propagar essas CA por estudantes que tomam contato com essas obras. Ainda assim, a frequência que estes emergiram ao longo da obra pode ser considerada baixa, ao comparar com o número total de URT analisadas.

Já como pontos positivos para o processo de ensino-aprendizagem da LC que identificamos na obra, pela óptica do PC da LC, podemos citar: a multiplicidade de contextos em que diferentes concepções são apresentadas, a partir de suas especificidades e compromissos próprios; um capítulo destinado a apresentar e discutir aproximações e afastamentos, possibilidades e limites, de algumas das principais teorias da ligação química e sua rede de conceitos relacionada; e também discussões, a partir de diferentes concepções da LC, para uma mesma problemática ou fenômeno, mostrando possibilidades dentro de teorias e concepções que são tidas muitas vezes como “concorrentes”. Esses pontos podem contribuir para o enriquecimento e tomada de consciência do próprio PC dos estudantes, ao tomar contato com diferentes concepções, entender contextos em que podem ser aplicadas e que compromissos epistemológicos e ontológicos as definem e as diferenciam.

5.2.2 Resultados e discussão da obra “Advanced Inorganic Chemistry”

A segunda obra analisada foi a sexta edição de “Advanced Inorganic Chemistry”, escrita por F. Albert Cotton, Geoffrey Wilkson, Carlos A. Murillo e Manfred Bochmann, publicada em 1999 pela John Wiley & Sons.

Nessa obra, identificamos concepções da LC relacionadas com todas as zonas do PC, porém com um único caso característico da primeira zona.

Ao longo da obra, as concepções não são propriamente atreladas a teorias específicas, como TLV e TOM, porém os conceitos e compromissos epistemológicos e ontológicos possibilitaram a identificação e diferenciação entre essas concepções. Diferentemente das demais obras, em que um capítulo ou seções eram destinadas especificamente a introduzir fundamentos de teorias da ligação química, nesta as concepções são utilizadas diretamente em contextos de aplicação, como em explicações acerca de propriedades de moléculas e compostos. Entendemos que isso é coerente com o escopo principal do livro, voltado para estudos específicos e mais avançados relacionados com a Química Inorgânica.

Ao todo, em 52 URT foram identificadas diferentes formas de conceber a LC, características diferentes zonas, em frequências mostradas na Tabela 6.

Tabela 6 - Frequência das zonas do PC de LC na obra "Advanced Inorganic Chemistry".

Zona do PC da LC	Frequência de URT
Conectividade Indiscriminada	1
Atratividade Estabilizadora	12
Remanescência Localizada	17
Deslocalização Sistemática	23
Total = 53	

Fonte: elaboração própria.

5.2.2.1 A primeira zona do PC da LC na obra "Advanced Inorganic Chemistry"

Em uma única URT ao longo de toda obra, observamos uma maneira de conceber a LC atrelada com compromissos característicos da primeira zona do PC, no trecho: "quando compostos não metálicos se combinam entre si, formam compostos não iônicos e não metálicos, às vezes compostos moleculares e às vezes polímeros infinitos" (Cotton *et al.*, 1999, p. 40, tradução nossa³⁶). Nesse trecho, vemos a *natureza* da LC explicada a partir de características dos átomos ligantes, sem se preocupar com uma discussão específica acerca da ligação em si. A LC é tida como uma "combinação" entre átomos, uma concepção realista que apresenta os compromissos epistemológicos e ontológicos da primeira zona. Podemos relacionar,

³⁶ When non-metallic compounds combine with one another they form compounds that are non-ionic and non-metallic, sometimes molecular and sometimes infinite polymers.

sobretudo, com a categoria *dependência incoerente* dessa zona, em que “a ligação covalente é definida a partir de uma relação com pouca ou nenhuma relação entre os conceitos, como metais, ametais, íons, moléculas” (Baltieri, 2020, p. 102).

5.2.2.2 A segunda zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”

Para as concepções associadas com a segunda zona, tivemos ao todo três contextos de aplicação, mostrados na Tabela 7 e com a frequências de URT para cada.

Tabela 7 - Usos e contextos de aplicação da segunda zona do PC da LC, na obra “Advanced Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Polaridade	5
Força e comprimento de ligações	5
Natureza da ligação	2
Total = 12	

Fonte: elaboração própria.

A *natureza da ligação* é definida como o par de elétrons compartilhado por dois núcleos (2c,2e) em duas URT ao longo da obra. Em uma dessas, destinada especificamente para explicar essa concepção da ligação, a natureza é explicada a partir da regra do octeto: “*Formação de ligações de pares de elétrons*. O octeto pode ficar completo tanto pela formação de três ligações simples, como na molécula de amônia (NH₃) e trifluoreto de nitrogênio (NF₃), quanto pela formação de ligações múltiplas, como no próprio nitrogênio molecular (:N ≡ N:)” (Cotton *et. al.*, 1999, p. 308, tradução nossa³⁷).

Nesse trecho, as características dessa concepção da LC são apresentadas em uma breve rede de conceitos: par de elétrons, octeto, ligações simples e múltiplas e também pela representação da ligação e moléculas a partir de estruturas de Lewis. Ao longo da obra, essas características e conceitos que são utilizados para explicar contextos em que a concepção da LC a partir da atração entre átomos, relacionada a segunda zona.

Um dos contextos de aplicação mais recorrente dessa zona, com cinco URT identificadas, se destinam a explicar a *polaridade* observada em algumas moléculas.

³⁷ *Formation of Electron-Pair Bonds*. The octet can be completed either by the formation of three single bonds, as in NH₃ or NF₃, or by multiple-bond formation, as in nitrogen itself (:N≡N:)

Nesses trechos, a diferença de uma propriedade dos átomos em ligação (a eletronegatividade) é utilizada para explicar ligações polares e apolares que, em conjunto com a geometria das moléculas, possibilita prever e explicar a polaridade resultante. Um exemplo está no trecho em que se explica a polaridade em compostos halogenados:

Dado que os átomos estão apenas um elétron a menos da configuração de um gás nobre, os elementos prontamente formam o anion X^- ou uma ligação covalente simples (...) Em geral, quando o halogênio forma uma ligação com outro átomo ou grupo mais eletronegativo que ele mesmo, a ligação será polar com uma carga parcialmente positiva no halogênio (Cotton *et. al.*, 1999, p. 547, tradução nossa³⁸).

Diferentemente do que temos para concepções características da primeira zona, em que propriedades dos átomos ligantes são o que *definem* a LC, nas URT identificadas para o contexto de polaridade há uma busca por uma definição em específico da ligação. Essa definição reside em processos atrativos entre átomos nessas URT, como no trecho destacado, em que a ligação leva a uma configuração mais estável (configuração de um gás nobre). As propriedades dos átomos, nesses casos, regulam as próprias propriedades da ligação, mas não a definem.

Também em cinco URT, a *força e comprimento de ligações* são explicadas a partir das propriedades dos átomos ligantes. Como exemplo, temos o extrato que explica a força das ligações entre átomos de hidrogênio (H) e halogênios (X): “A força intrínseca das ligações H – X e a estabilidade térmica dos hidretos covalentes parecem depender da eletronegatividade e do tamanho do elemento X” (Cotton *et. al.*, 1999, p. 62, tradução nossa³⁹). Novamente, temos que esses contextos podem ser relacionados com a segunda zona do PC, uma vez que se concebe a LC com uma natureza definida pelo compartilhamento de dois elétrons por dois centros e atrelada a um aumento na estabilidade do composto ou molécula formada.

Para as URT que concebem a LC característica da segunda zona, pudemos observar uma definição relacionada, principalmente, com a estabilidade quando átomos atingem o octeto completo, e explicações de propriedades das moléculas reguladas por propriedades dos átomos ligantes. Os contextos em que essa

³⁸ Since the atoms are only one electron short of the noble gas configuration, the elements readily form the anion X^- or a single covalent bond (...). In general, when a halogen atom forms a bond to another atom or group more electronegative than itself, the bond will be polar with a partial positive charge on the halogen.

³⁹ The intrinsic strength of H – X bonds and the thermal stability of covalent hydrides seem to depend on the electronegativity and size of the element X.

concepção foi aplicada, embora escassos e explorados de maneira direta e simplista, se mostram condizentes com as especificidades e possibilidades para a concepção e os compromissos epistemológicos e ontológicos que a estabilizam.

Em uma URT, também pudemos observar o uso concepção de LC característica da segunda zona, porém associado com o conceito de *orbital*:

As propriedades únicas do carbono são consequência de suas combinações de 4 orbitais de ligação de valência, 4 elétrons de valência e eletronegatividade moderadamente alta. Assim, (...) forma facilmente anéis e cadeias com base em ligações covalentes de dois centros (pares de elétrons compartilhados por dois átomos) (Cotton *et. al.*, 1999, p. 131, tradução nossa⁴⁰).

Como apontado por Rozentaliski (2013) e Autschbach (2012), esse uso indiscriminado do conceito de orbital é recorrente em diferentes LD, e pode comprometer a compreensão e o domínio das características epistemológicas e ontológicas associadas a ele.

5.2.2.3 A terceira zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”

Com relação as 17 URT em que foram identificadas concepções da LC características da terceira zona. Os contextos de aplicação dessa concepção e suas respectivas frequências mostradas na Tabela 8.

Tabela 8 - Usos e contextos de aplicação da terceira zona do PC da LC, na obra “Advanced Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Geometria molecular	5
Força e comprimento de ligações	5
Formação de ligações e estabilidade de compostos	4
Hipervalência	3
Total = 17	

Fonte: elaboração própria.

Ao longo da obra, não foram observadas URT que se destinavam, em específico, a explicar a *natureza* da LC em si, em termos da terceira zona do PC, suas características principais e a rede de conceitos relacionada. Assim, pudemos identificar a emergência dessa concepção a partir dos compromissos epistemológicos

⁴⁰ The unique properties of carbon are a consequence of its combinations of 4 valence bonding orbitals, 4 valence electrons, and moderately high electronegativity (...) Thus, (...) carbon readily forms rings and chains based on two-centre covalent bonds (electron pairs shared by two atoms).

e ontológicos utilizados pelos autores na explicação de propriedades de substâncias e moléculas. De uma maneira geral, nessas URT temos que a LC é tida a partir da sobreposição de orbitais atômicos, formação de orbitais hibridizados e sendo considerada a possibilidade de ressonância entre diferentes estruturas para a molécula.

Nas 16 URT em que foram identificados esses compromissos, pudemos agrupar em quatro contextos diferentes, baseados na aplicação principal a qual se destinam a explicar.

Um dos contextos mais recorrentes da concepção de LC da terceira zona foi em explicações acerca da *geometria molecular*, identificados em cinco URT. Nessas, a disposição de orbitais hibridizados em torno do átomo central e as diferentes estruturas possíveis, construídas a partir dos princípios da ressonância, são utilizadas para explicar a geometria de moléculas. Como exemplo, temos as estruturas canônicas possíveis, obtidas a partir da aproximação por ressonância, para o tetranitreto de tetraenxofre, mostradas na Figura 9.

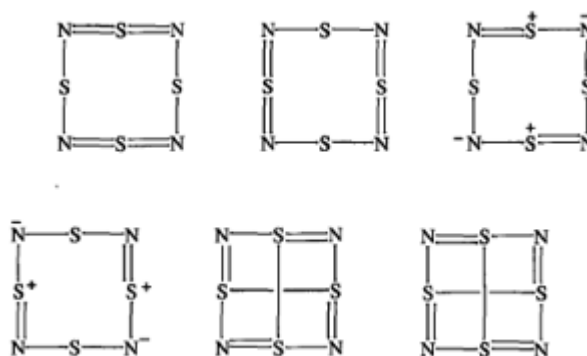


Figura 9 – Estruturas de ressonância canônicas para a molécula de S₄N₄.

Fonte: Cotton *et. al*, 1999, p. 510.

Nas URT se destinam explicar a *força e comprimento de ligações*, o conceito de ressonância entre estruturas possíveis de uma molécula possibilita verificar divergências entre o tamanho previsto para uma ligação e o real, medido empiricamente. Nesses trechos, são indicados os casos em que o comprimento da ligação condiz com um valor intermediário entre uma ligação simples e uma dupla ou uma dupla e uma tripla, apontando-se também um certo grau de caráter duplo ou triplo para as ligações. A ressonância, em conjunto com a hibridização, também é usada para explicar quando ligações em uma molécula são *equivalentes*, mesmo que a representação de Lewis não preveria isto. Assim, esses trechos trazem uma

comparação entre possibilidades e especificidades em que duas concepções diferentes da LC podem apresentar para resolução de problemas. Um exemplo se encontra na explicação para a molécula de óxido trifluoramina (ONF_3):

ONF_3 (...) não é um típico óxido de amina, R_3NO , dado que a ligação curta N – O de 1,159 Å indica um alto grau de caráter de ligação dupla. É melhor descrito como um híbrido de ressonância de estruturas de ONF_2^+F^- ; isso é consistente com as ligações polares consideravelmente longas N – F, 1,432 Å (Cotton *et. al.*, 1999, p. 340, tradução nossa⁴¹).

Vale citar que, em um mesmo trecho, se observa explicações acerca do comprimento de uma ligação e a geometria característica da molécula a partir das estruturas de ressonância, como na explicação para a molécula de trióxido de enxofre (SO_3):

A molécula livre, na fase gasosa, tem uma estrutura plana e triangular que pode ser considerada um híbrido de ressonância envolvendo ligações $\text{p}\pi\text{-p}\pi$ S – O, como em (Figura 10), com uma ligação π adicional através da sobreposição de orbitais preenchidos $\text{p}\pi$ do oxigênio com orbitais vazios $\text{d}\pi$ do enxofre, para explicar a distância muito curta da ligação S – O de 1,41 Å (Cotton *et. al.*, 1999, p. 521, tradução nossa⁴²).

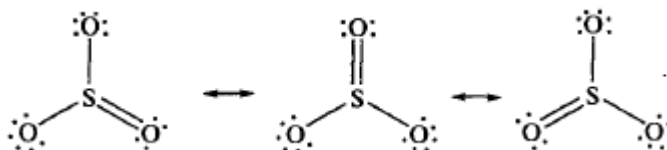


Figura 10 – Estruturas de ressonância para a molécula de trióxido de enxofre (SO_3).

Fonte: Cotton *et. al.*, 1999, p. 521.

Em quatro URT, os compromissos característicos da terceira zona foram utilizados em explicações acerca da *estabilidade de compostos*, a partir de ligações entre átomos que levam a um estado de menor energia e, portanto, mais estável do que quando estes se encontram isolados. Como exemplo, temos a URT em que é explicada a formação de moléculas em que átomos de oxigênio (O) se encontram ligados covalentemente a dois outros átomos iguais, por ligações do tipo σ :

⁴¹ ONF_3 (...) compound is not typical amine oxide, R_3NO , since the short N – O bond of 1.159 Å indicates a high degree of double bond character. It is best describes as a resonance hybrid of ONF_2^+F^- structures; this is consistent with the rather long polar N – F bonds, 1.432 Å.

⁴² The free molecule, in the gas phase, has a planar, triangular structure that may be considered to be a resonance hybrid involving $\text{p}\pi\text{-p}\pi$ S – O bonding, as in (...), with additional π bonding via overlap of filled oxygen $\text{p}\pi$ orbitals with empty sulfur $\text{d}\pi$ orbitals, to account for the very short S – O distance of 1.41 Å.

O caso limite da interação π em sistemas $X - O - X$ ocorre quando as ligações σ são formadas por dois orbitais híbridos sp lineares ao oxigênio, deixando assim dois pares de elétrons π em orbitais p puros; estes podem então interagir com orbitais $d\pi$ vazios nos átomos X (Cotton *et. al.*, 1999, p.448, tradução nossa⁴³).

Uma exceção observada, no entanto, mostra uma combinação entre conceitos e compromissos característicos de distintas maneiras de conceber a ligação:

O nitrogênio tem apenas quatro orbitais disponíveis para formação de ligações, e um máximo de quatro ligações 2c-2e podem ser formadas. No entanto, como a formação de três ligações de pares de elétrons completa o octeto $:N(:R)_3$, e o átomo de nitrogênio possui então um par de elétrons isolado, quatro ligações 2c-2e só podem ser formadas (...) por perda de um elétron (...). Esta perda de um elétron estabelece uma configuração de estado de valência para o nitrogênio (como N^+) com quatro elétrons desemparelhados em orbitais híbridos sp^3 (Cotton *et. al.*, 1999, p. 311, tradução nossa⁴⁴).

Nesse trecho, a formação da LC mescla elementos de uma concepção característica da segunda zona (a ligação como dois elétrons compartilhados por dois centros, de forma a ambos atingirem o octeto) e da terceira (elétrons ocupando orbitais hibridizados). Esse uso indiscriminado pode resultar em obstáculos para entender as diferenças e especificidades na epistemologia e ontologia próprias de teorias e concepções distintas. Como apontado por Rozentalski (2013), se observa uma tendência em LD de utilizar o conceito de “orbital” em combinação com outros conceitos de concepções realistas ou do racionalismo clássico para a ligação química. Isso pode levar a um esvaziamento do significado de orbital a partir da resolução de funções de onda e a uma substancialização desse conceito, o que pode refletir no estabelecimento de obstáculos ao ensino-aprendizagem das teorias e concepções relacionadas.

Em outras três URT, a *hipervalência* de compostos é explicada a partir da concepção da LC característica da terceira zona. Nesses casos, a possibilidade se realizar mais ligações do que o número previsto pela regra do octeto reside na interação de orbitais d , quando disponíveis, como tem-se no trecho:

⁴³ The limiting case of π interaction in $X - O - X$ systems occurs when the σ bonds are formed by two linear sp hybrid orbitals to oxygen, thus leaving two pairs of π electrons in pure p orbitals; these can then interact with an empty $d\pi$ orbitals on the X atoms.

⁴⁴ Nitrogen has only four orbitals available for bond formation, and a maximum of four 2c-2e bonds may be formed. However, since formation of three electron-pair bonds complete the octet $:N(:R)_3$, and the nitrogen atom then possesses a lone pair of electrons, four 2c-2e bonds can only be formed (...) by loss of an electron (...). This loss of an electron gives a valence state configuration for nitrogen (as N^+) with four unpaired electrons in sp^3 hybrid orbitals.

Os elementos do S ao Po empregam orbitais d juntamente com seus orbitais s e p para formar mais de quatro ligações σ (como em SF_6), e também fazem uso frequente de orbitais $d\pi$ para formar ligações múltiplas. Assim, por exemplo, no íon sulfato, onde os orbitais s e p são usados na ligação σ , o encurtamento das ligações S – O sugere que deve haver um caráter considerável de ligações múltiplas. A explicação usual para isso é que os orbitais $d\pi$ vazios do enxofre aceitam elétrons dos orbitais $p\pi$ preenchidos do oxigênio (Cotton *et. al*, 1999, p. 498, tradução nossa⁴⁵).

Como considerações gerais sobre as URT analisadas nesta seção, temos que a abordagem da LC centrada na sobreposição de orbitais atômicos foi utilizada em alguns poucos contextos para explicar características e propriedades de moléculas e compostos. Em geral, os compromissos epistemológicos e ontológicos utilizados se mostraram adequados a essa concepção, e as explicações se centraram em ideias de ressonância entre estruturas canônicas e de formação de orbitais híbridos. Em uma única exceção, verificamos combinação de conceitos entre a terceira zona e a segunda, o que pode se edificar como obstáculos a compreensão das especificidades das concepções que carregam.

5.2.2.4 A quarta zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”

Para as concepções associadas com a quarta zona do PC da LC, temos que foram identificadas em 23 URT, com seis contextos diferentes de aplicação, como mostrados na Tabela 9.

Tabela 9 - Usos e contextos de aplicação da quarta zona do PC da LC, na obra “Advanced Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Força e comprimento de ligações	13
Paramagnetismo/diamagnetismo	3
Geometria molecular	2
Compostos deficientes em elétrons	2
Cor em compostos	2
Condutividade elétrica	1
Total = 23	

Fonte: elaborado pelos autores.

⁴⁵ The S-Po elements employ d orbitals together with their s and p orbitals to form more than four σ bonds (as in SF_6), and they also make frequent use of $d\pi$ orbitals to form multiple bonds. Thus, for example, in the sulfate ion, where the s and p orbitals are used in σ bonding, the shortness of the S – O bonds suggests that there must be considerable multiple-bond character. The usual explanation for this is that empty $d\pi$ orbitals of sulfur accept electrons from filled $p\pi$ orbitals of oxygen.

Para a quarta zona do PC, não identificamos, ao longo do livro, trechos em que se destinavam explicitamente a explicar como a LC é formada a partir de princípios característicos e explicações acerca de sua natureza. O que encontramos foram os compromissos epistemológicos e ontológicos dessa zona utilizados em explicações acerca de propriedades das moléculas ou compostos. Nessas explicações, muitas delas se centram em dois aspectos principais obtidos para uma molécula: a *ordem de ligação* e a *distribuição eletrônica* em orbitais moleculares.

Como exemplo, em 13 URT observa-se o uso dos compromissos característicos da quarta zona para explicar a *força e comprimento de ligações*, sobretudo a partir do cálculo da ordem de ligação. Nesses trechos, uma maior BDE e ligações mais curtas são esperadas quando há mais elétrons em orbitais moleculares ligantes, que estabilizam a molécula, do que em antiligantes, que desestabilizam. Esses compromissos podem ser encontrados no trecho:

A molécula de NO tem a configuração eletrônica $(\sigma_g)^2(\sigma_u)^2(\sigma_g, \pi_u)^6(\pi_g)^1$. O elétron π antiligante desemparelhado torna a molécula paramagnética e cancela parcialmente o efeito dos elétrons de ligação π . Assim, a ligação π é de 2,5, consistente com uma distância interatômica de 1,15 Å, que é intermediária entre a distância de ligação tripla em NO^+ de 1,06 Å e distâncias características de ligação dupla de ~ 1,20 Å. (Cotton *et. al.*, 1999, p. 326, tradução nossa⁴⁶).

Nesse mesmo trecho, os autores explicam, a partir da distribuição eletrônica da molécula obtida usando dos princípios da CLOA, a propriedade de *paramagnetismo* da molécula de óxido de nitrogênio (NO), a partir da disposição de elétrons emparelhados ou desemparelhados em orbitais moleculares. Ao todo, em três URT identificamos explicações com essa finalidade e que resguardam esses mesmos compromissos para explicar o fenômeno, constatado empiricamente.

Compostos “*deficientes em elétrons*” foram explicadas em duas URT a partir da quarta zona da LC. No trecho transcrito abaixo, a partir da análise dos orbitais moleculares ocupados da molécula de diborano (B_2H_6), os autores apresentam uma explicação para a estabilidade dessa molécula, sem precisar considerar ligações com múltiplos centros, do tipo 3 centros para 2 elétrons. Esse trecho mostra uma distinção da maneira como historicamente as ligações nessa, e em outras moléculas, eram

⁴⁶ The NO molecule has the electron configuration $(\sigma_g)^2(\sigma_u)^2(\sigma_g, \pi_u)^6(\pi_g)^1$. The unpaired π antibonding electron renders the molecule paramagnetic and partly cancels the effect of the π -bonding electrons. Thus the bond π is 2.5, consistent with an interatomic distance of 1.15 Å, which is intermediate between the triple bond distance in NO^+ of 1.06 Å and representative double-bond distances of ~1.20 Å.

explicadas a partir de concepções da ligação atreladas ao compartilhamento de elétrons, sobretudo.

Como todos os orbitais de ligação estão ocupados em ambos B_2H_6 (...) não há de fato uma “deficiência” em elétrons em nenhuma das moléculas. No entanto, a noção de deficiência de elétrons como uma propriedade intrínseca dos boranos tornou-se arraigada ao longo dos anos. (...) os hidretos de boro como uma classe são sistemas moleculares com a camada preenchida e intrinsecamente estáveis (todos os orbitais de ligação preenchidos) e não são, em nenhum aspecto verdadeiro, deficientes em elétrons (Cotton *et. al.*, 1999, p. 145, tradução nossa⁴⁷).

Em duas URT, a cor em compostos covalentes é explicada a partir da possibilidade de transição de elétrons de um orbital preenchido para um orbital vazio, quando tal transição está associada com um comprimento de onda dentro do espectro de luz visível. No trecho em destaque, temos a explicação da coloração característica do iodo molecular (I_2), a partir da configuração eletrônica obtida da CLOA.

A molécula de iodo tem a estrutura eletrônica $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 \pi_u^4 2\sigma_g^2 1\sigma_g^2 \pi_g^4$ com um orbital $2\sigma_u$ vazio, que é antiligante. A cor violeta normal do iodo gasoso é atribuída à absorção causada por uma transição permitida $\pi_g \rightarrow 2\sigma_u$ (Cotton *et. al.*, 1999, p. 552, tradução nossa⁴⁸).

Por fim, em uma única URT temos a *condutividade elétrica* característica de um composto, o polímero $(SN)_x$ explicada a partir de compromissos característicos para a da quarta zona do PC da LC. Nesse caso, a deslocalização de elétrons π ao longo da estrutura molecular “quase-planar” explica a possibilidade de condução elétrica pelo composto.

Como considerações gerais desta seção, podemos destacar que, diferentemente do que observamos para as demais concepções, para as URT identificadas em que emerge compromissos da quarta zona não encontra-se uma definição direta da LC e sua natureza. Ao longo dos trechos, temos que os compromissos são utilizados para explicar importantes propriedades e constatações empíricas, grande parte delas atrelada ao cálculo da ordem de ligação e à distribuição eletrônica dos orbitais moleculares.

⁴⁷ Since all bonding orbitals are occupied in both B_2H_6 (...) there is in fact no “deficiency” of electrons in either molecule. Nonetheless, the notion of electron deficiency as an intrinsic property of the boranes became entrenched over the years. (...) the boron hydrides as a class are intrinsically stable, filled-shell molecular systems (all bonding orbitals filled) and are not in any true respect deficient in electrons.

⁴⁸ The iodine molecule has the electronic structure $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 \pi_u^4 2\sigma_g^2 1\sigma_g^2 \pi_g^4$ with an empty $2\sigma_u$ orbital, which is antibonding. The normal violet color of gaseous iodine is attributable to absorption caused by an allowed $\pi_g \rightarrow 2\sigma_u$ transition.

5.2.2.4 Considerações gerais acerca do uso de diferentes concepções para a LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”

Na obra analisada, pudemos observar URT em que emergiram as diferentes concepções da LC que se encontram representadas nas zonas do PC. Enquanto em um único trecho observamos compromissos atrelados a primeira zona, a concepção mais recorrente foi a característica da quarta zona, emergindo em 23 dos 53 trechos identificados. Também foi a concepção utilizada para explicar uma diversidade maior de propriedades e fenômenos, com seis contextos de aplicação. Em seguida, a terceira zona foi observada em 16 URT, com quatro contextos diferentes de explicação, e a segunda zona emergiu em 12 URT, utilizada em resoluções classificadas em de três tipos diferentes.

As ocorrências mais frequentes de concepções oriundas de teorias e modelos do Racionalismo Contemporâneo e Moderno apontam uma adequação da obra com o público-alvo a que se destina. O conceito da LC se mostra combinado a conceitos e compromissos que perpassam diferentes níveis de complexidade, e muitos estudantes apresentam uma tendência em concebe-lo a partir de ideias realistas e concretas (Fernandes, 2019). Com isso, o contato de explicações que levem em conta aspectos abstratos e advindos de resoluções matemáticas para a LC pode ser uma interessante estratégia visando a evolução do PC dos próprios estudantes, em direção a estabilização das zonas mais racionalistas do perfil.

Atrelado a isso, também se mostraria desejável apresentar distinções de natureza epistemológica e ontológica para as concepções, de modo a contribuir para a transição efetiva do estudante entre diferentes zonas do perfil, de maneira a entender usos mais adequados para contextos específicos. No LD analisado e discutimos, vimos poucos contextos sendo explorados, sobretudo para as três primeiras zonas do PC. Mesmo que não seja necessariamente um obstáculo a compreensão do conceito em si, a carência de uma multiplicidade de contextos pode ser uma limitação na compreensão da polissemia em torno da LC e na comparação entre suas características que as individualizam. Em contraponto, vale destacar um trecho em que os autores apontam diferenças epistemológicas e ontológica entre duas explicações possíveis para um mesmo fenômeno:

A ligação múltipla também ocorre em compostos oxo. Por exemplo, NO^{2-} e NO^{3-} podem ser considerados híbridos de ressonância na abordagem da ligação de valência. Do ponto de vista do orbital molecular, considera-se a existência de um orbital molecular π estendendo-se simetricamente por todo

o íon e contendo os dois elétrons π (Cotton *et. al.*, 1999, p. 312, tradução nossa⁴⁹)

Diferentemente do que observamos em trechos em que a combinação de conceitos advindos da TLV e TOM é feita de maneira indiscriminada, aqui suas especificidades e possibilidades são apresentadas e comparadas, permitindo ao leitor acesso a uma multiplicidade de significados para a LC. Como apontado por Mortimer e Amaral (2014), uma tendência em muitos LD reside justamente na carência dessa multiplicidade, o que pode levar estudantes a assumirem um conceito como único e muito bem definido a partir de características de uma teoria em específico. Trechos como o destacado podem auxiliar para que reconheçam a pluralidade em torno do conceito e as possibilidades de contextos de aplicação serem explicados a partir de mais de uma forma de pensar, desde que devidamente respeitadas suas especificidades.

Quanto a obstáculos ao ensino, observamos alguns poucos trechos em que o uso de compromissos epistemológicos e ontológicos eram incondizentes com a concepção de LC identificada. Mesmo que ocorram em uma frequência consideravelmente baixa, algumas das principais dificuldades atreladas a compreensão da polissemia em torno de um conceito pelos estudantes está atrelada a obstáculos epistemológicos e ontológicos (Vairo; Rezende filho, 2013). Com isso, é importante que a leitura de obras como esta sejam orientadas de modo a não incorrer nesses obstáculos.

5.2.3 Resultados e discussão da obra “*Concise Inorganic Chemistry*”

A terceira obra analisada foi a quinta edição de “*Concise Inorganic Chemistry*”, escrita por J. D. Lee e publicada em 1996 pela Chapman & Hall Ltd.

Nessa obra, foram identificadas concepções características da segunda, terceira e da quarta zona do PC da LC. A frequência com que cada uma delas emergiu em URT ao longo da obra é mostrada na Tabela 10.

Tabela 10 - Frequência das zonas do PC de LC na obra “*Concise Inorganic Chemistry*”.

Zona do PC da LC	Frequência de URT
------------------	-------------------

⁴⁹ Multiple bonding occurs also in oxo compounds. For example, NO_2^- and NO_3^- can be regarded as resonance hybrids in the valence bond approach. From the MO viewpoint, one considers the existence of a π MO extending symmetrically over the entire ion and containing the two π electrons

Atratividade Estabilizadora	31
Remanescente Localizada	33
Deslocalização Sistemática	39
Total = 103	

Fonte: elaboração própria.

Assim como foi observado na obra de Atkins *et. al.* (2010), Lee (1996) dedica um dos capítulos da obra (o quarto) para explicar as principais teorias da LC, como a teoria de Lewis, TLV, TOM, e também tratando da teoria de Sidgwick-Powell e VSPER. Com isso, introduzem e explicitam os fundamentos, compromissos e a da rede de conceitos características de cada uma dessas teorias.

5.2.3.1 A segunda zona do PC da LC na obra “*Concise Inorganic Chemistry*”

Para a segunda zona do PC da LC, foram identificadas ao longo da obra 31 URT em que a sua concepção característica é explicada (contexto de *natureza da ligação*) ou foi utilizada para explicar fenômenos e propriedades de moléculas e compostos. Os contextos de uso são mostrados na Tabela 11.

Tabela 11 - Usos e contextos de aplicação da segunda zona do PC da LC, na obra “*Concise Inorganic Chemistry*”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Formação de ligações e estabilidade de compostos	20
Geometria molecular	6
Natureza da ligação	4
Polaridade	1
Total = 31	

Fonte: elaboração própria.

Em quatro URT ao longo do Capítulo 4 da obra, o autor traz fundamentos para explicar a *natureza da ligação*, concebida, essencialmente, como o *par de elétrons compartilhado* entre dois centros, a partir do enunciado: “a teoria de Lewis foi a primeira explicação de uma ligação covalente em termos de elétrons geralmente aceita. Se dois elétrons são compartilhados entre dois átomos, isso constitui uma ligação e une os átomos” (Lee, 1996, p. 72, tradução nossa⁵⁰). Outros conceitos são

⁵⁰ The Lewis theory was the first explanation of a covalent bond in terms of electrons that was generally accepted. If two electrons are shared between two atoms, this constitutes a bond and binds the atoms together.

utilizados para explicar quando uma ligação será do tipo covalente ou não, sobretudo baseado na diferença de eletronegatividade entre os átomos ligantes.

Com os principais compromissos epistemológicos e ontológicos para apresentados e alguns dos seus conceitos relacionados a LC explicados, passa-se para a aplicação dessa concepção em explicações acerca de propriedades de moléculas e substâncias.

O principal contexto em que a segunda zona emerge, com 20 URT, foi para explicações acerca do aumento na *estabilidade* de compostos ao ocorrer o compartilhamento de elétrons entre átomos. Esse aumento é quando os átomos, ao compartilharem elétrons, atingem o arranjo eletrônico de um gás nobre, como mostrado no trecho:

O átomo de carbono tem quatro elétrons a menos da estrutura do gás nobre, então ele forma quatro ligações, e os átomos de cloro têm um elétron a menos, então cada um deles forma uma ligação. Ao compartilhar elétrons dessa forma, tanto o carbono quanto todos os quatro átomos de cloro atingem uma estrutura de gás nobre (Lee, 1996, p. 33, tradução nossa⁵¹).

Como exemplo para o átomo de carbono realizando quatro ligações, o autor representa a molécula de tetracloreto de carbono (CCl_4) (Figura 11), em que se observa as ligações entre C e Cl como pares de elétrons, representados por pontos. Nesse tipo de representação, observamos compromissos ontológicos e epistemológicos característicos da segunda zona, sobretudo relacionados com a teoria de Lewis.

O segundo contexto com maior recorrência da segunda concepção da LC, com seis URT identificadas, é em explicações acerca da *geometria molecular*. Nesses trechos, os efeitos repulsivos entre pares de elétrons, compartilhados por dois núcleos ou não, são fator central na determinação da geometria molecular, aplicando-se os princípios da VSPER. Como exemplo, temos a explicação acerca da geometria para a molécula de trifluoreto de boro (BF_3): “a forma da molécula BF_3 é triângulo planar com ângulos de ligação de 120° . Isto é previsto pela teoria VSPER como a forma mais estável para três pares de elétrons externos ao redor de B” (Lee, 1996, p. 384, tradução nossa⁵²).

⁵¹ The carbon atom is four electrons short of the noble gas structure, so it forms four bonds, and the chlorine atoms are one electron short, so they each form one bond. By sharing electrons in this way, both the carbon and all four chlorine atoms attain a noble gas structure.

⁵² The shape of the BF_3 molecule is a planar triangle with bond angles of 120° . This is predictable by the VSPER theory as the most stable shape for three outer electrons pairs round B.

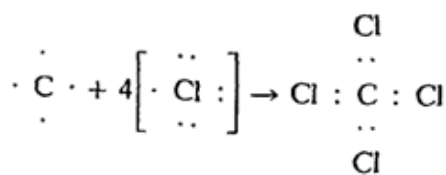


Figura 11 - Representação da molécula de tetracloreto de carbono (CCl₄) a partir da concepção de LC como par de elétrons compartilhado.

Fonte: Lee, 1996, p. 33.

Por fim, em uma URT a polaridade característica do monofluoreto de cloro (ClF) e do fluoreto de hidrogênio (HF) é explicada a partir da diferença nas eletronegatividades entre os átomos ligantes, com os pares de elétrons compartilhados de maneira não-igualitária sendo utilizados para explicar a polaridade observada.

Considere, por exemplo, as moléculas ClF e HF. O flúor é o átomo mais eletronegativo e atrai elétrons com mais força do que qualquer outro elemento quando ligado covalentemente. Os elétrons de ligação passam mais tempo ao redor do F do que ao redor do outro átomo, então o átomo de F tem uma carga negativa muito pequena δ^- e o átomo (Cl ou H) tem uma pequena carga positiva δ^+ (Lee, 1996, p. 41, tradução nossa⁵³).

De uma maneira geral, nas URT em que a concepção de LC característica da segunda zona do PC é utilizada, observamos uma coerência entre os compromissos epistemológicos e ontológicos que emergem nos trechos e aqueles que estabilizam essa concepção. A LC é tratada, essencialmente, como o par de elétrons compartilhado, e a partir de características decorrentes de como se dá esse compartilhamento, podem ser explicadas diferentes propriedades em moléculas e substâncias.

No entanto, em alguns trechos observamos o uso conjunto de conceitos de teorias distintas e que concebem a LC de maneira diferente. Podemos destacar algumas explicações em que a LC é tida como o par de elétrons compartilhados, mas que envolvem *orbitais* sendo preenchidos por esses elétrons. No trecho abaixo, vemos esse uso em um mesmo conceito, sem distinção:

⁵³ Consider for example the molecules ClF and HF. Fluorine is the most electronegative atom, and it attracts electrons more strongly than any other element when covalently bonded. The bonding electrons spend more time round the F than round the other atom, so the F atom has a very small negative charge δ^- and the atom (Cl or H) has a small positive charge δ^+ .

O número de ligações formadas por um átomo é geralmente igual ao número de elétrons desemparelhados no estado fundamental (...), ou seja, o estado de energia mais baixo. No entanto, em alguns casos, o átomo pode formar mais ligações do que isso. Isso ocorre pela excitação do átomo (ou seja, fornecendo-lhe energia). Quando os elétrons que estavam emparelhados no estado fundamental são desemparelhados e promovidos a orbitais vazios adequados (Lee, 1996, p. 80, tradução nossa⁵⁴).

Esse tipo de combinação de conceitos, feito de maneira indiscriminada, pode levar a obstáculos à aprendizagem, como apontado por Rozentalski (2013). Isto porque os compromissos epistemológicos e ontológicos que devem ser levados em conta para conceber a LC como o par de elétrons compartilhado são incompatíveis com a própria natureza de *orbitais*.

5.2.3.2 A terceira zona do PC da LC na obra “Concise Inorganic Chemistry”

Na análise dos trechos feito a partir da emergência de concepções atreladas aos compromissos característicos da terceira zona do PC da LC, encontramos 33 URT, utilizadas em cinco contextos de aplicação, como mostrado na Tabela 12.

Tabela 12 - Usos e contextos de aplicação da terceira zona do PC da LC, na obra “Concise Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Geometria molecular	14
Formação da ligação e estabilidade de compostos	10
Natureza da Ligação	5
Força e comprimento da ligação	2
Hipervalência	2
Total = 33	

Fonte: elaboração própria.

Nos cinco trechos dedicados a introduzir explicações da *natureza* da LC, nos moldes da terceira zona do PC. A ligação é concebida a partir da *sobreposição* de orbitais atômicos e também é explicado o processo de *hibridização*, a partir da combinação de funções de ondas dos orbitais atômicos, destacado na Figura 12 e no trecho:

A combinação ou mistura das funções de onda dos orbitais atômicos dessa forma é chamado de hibridização. A mistura de um orbital s e três p dessa maneira resulta em quatro orbitais híbridos sp^3 . A forma de um orbital sp^3 é

⁵⁴ The number of bonds formed by an atom is usually the same as the number of unpaired electrons in the ground state i.e. the lower energy state. However, in some cases the atom may form more bond than this. This occurs by excitation of the atom (i.e. providing it with energy). When electrons which were paired in the ground state are unpaired and promoted into suitable empty orbitals.

mostrada na (Figura 14). Dado que um lóbulo é expandido, ele pode se sobrepor com mais eficiência do que um orbital s ou um orbital p puro. (Lee, 1996, p. 82, tradução nossa⁵⁵).

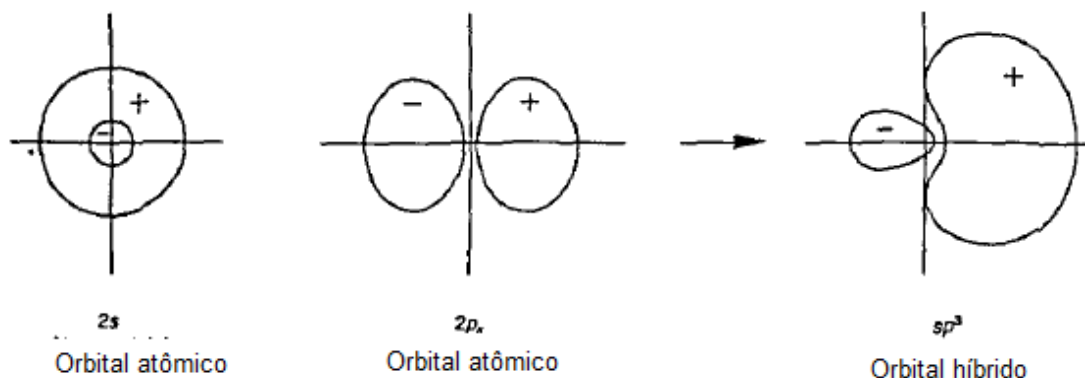


Figura 12 – Exemplo de hibridização para a molécula de CH_4 .

Fonte: Adaptado de Lee, 1996, p. 82.

Os compromissos escolhidos pelo autor e a rede de conceitos introduzida e explicada nesses trechos emergiram ao longo em aplicações da concepção característica da terceira zona para explicar propriedades de moléculas e substâncias.

Para o contexto mais recorrente, foram identificados 14 URT em que a *geometria* característica de uma molécula foi explicada a partir da configuração eletrônica no estado fundamental e excitado do átomo central. Nessas, destaca-se o uso de orbitais *hibridizados* para demonstrar como os elétrons de valência estão distribuídos. Como exemplo, temos a explicação acerca da geometria de boratos: “em boratos simples, cada átomo de B está ligado a três oxigênios, arranjados nos vértices de um triângulo equilátero. Isso pode ser previsto a partir dos orbitais utilizados para a ligações” (Lee, 1996, p. 376, tradução nossa⁵⁶). A Figura 13 demonstra como a estrutura eletrônica no estado excitado possibilita prever a geometria característica. Vale ressaltar que o autor aponta que o “estado excitado” utilizado para explicar a distribuição eletrônica, nesse e em outros casos ao longo da obra, não se trata, necessariamente, de um estado *real* que o átomo passa, mas sim um *recurso* ou

⁵⁵ Combining or mixing the wave functions for the atomic orbitals in this way is called hybridization. Mixing one s and three p orbitals in this way gives four sp^3 hybrid orbitals. The shape of an sp^3 orbital is shown in Figure (...). Since one lobe is enlarged, it can overlap more effectively than an s orbital or a p orbital on its own.

⁵⁶ In the simple borates, each B atom is bonded to three oxygen atoms, arranged at the corners of an equilateral triangle. This would be predicted from the orbitals used for bonding.

modelo que possibilita inferir para explicar algumas propriedades observadas em moléculas e compostos.

Nas URT relacionadas com a geometria molecular, a partir da concepção característica da terceira zona, observa-se importantes diferenças para o tratamento a partir da concepção da segunda zona, discutida na seção anterior. A LC passa de uma representação do par de elétrons compartilhado para a sobreposição de orbitais atômicos, demarcando mudanças na epistemologia e também na ontologia que estabiliza o conceito. Dessa maneira, a obra explora situações em que a geometria pode ser prevista a partir de diferentes tratamentos, como VSPER e a partir da distribuição eletrônica em orbitais, destacando suas especificidades, possibilidades e limites.

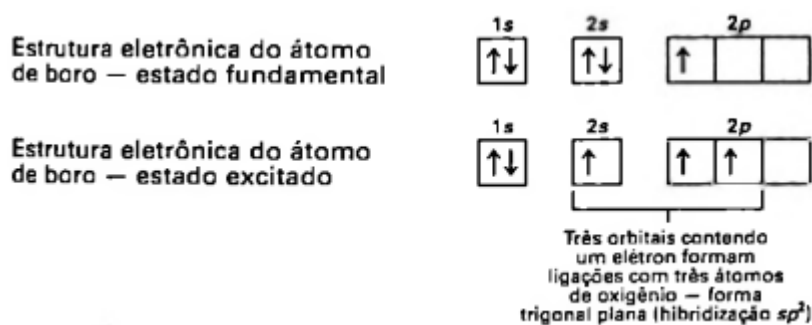


Figura 13 - Distribuição eletrônica nos estados fundamental e excitado do átomo de boro, em boratos.

Fonte: adaptado de Lee, 1996, p. 376.

O segundo caso mais recorrente da terceira zona, com 10 URT identificadas, foi para explicações acerca da *formação de ligações e estabilidade de compostos*. A partir do processo de hibridização, a formação de LC que leva a um abaixamento na energia total do sistema está relacionado com sua estabilização. Vale ressaltar que o autor, nesse trecho em outros ao longo da obra, frisa que essa mudança na configuração eletrônica para um estado “excitado” trata-se de um recurso utilizado em cálculos, não sendo necessariamente um estado real pelo qual o átomo passa. São considerados, nessas explicações, processos de atração e repulsão e o saldo entre processos que estabilizam e desestabilizam o sistema, como no trecho que explica a formação de quatro LC em compostos do Grupo 14:

A maioria dos compostos são tetravalentes (...) com todos os quatro elétrons externos participando da ligação. Na teoria da ligação de valência, isso é explicado pela promoção de elétrons do estado fundamental para um estado

excitado. A energia necessária para desemparelhar e promover o elétron é mais do que compensada pela energia liberada na formação de duas ligações covalentes extras. A distribuição dos quatro orbitais (...) é consistente com uma hibridização sp^3 (Lee, 1996, p. 412, tradução nossa⁵⁷).

Nos trechos em que a estabilidade é explicada a partir da formação de orbitais híbridos, temos uma abordagem que se distingue em diferentes pontos daquela característica da segunda zona, associada com configuração eletrônica de gás nobre. Para as concepções discutidas a partir dos compromissos da terceira zona, temos que a LC é um processo, definida do equilíbrio entre etapas que envolvem todo o sistema molecular e efeitos de estabilização e desestabilização.

Ainda com relação aos contextos da terceira zona do PC da LC, em dois casos tivemos a *força* (sobre termos da BDE) e o *comprimento de ligações* em moléculas, obtidos empiricamente, explicados a partir de compromissos característicos da concepção característica dessa zona. Nesses, a possibilidade de uso de orbitais hibridizados permite explicar a multiplicidade das ligações (simples, duplas e triplas) e relacionar com o comprimento da ligação. Além disso, também é possível explicar casos em que ligações apresentam comprimento equivalente, ao ser relacionado com o conceito de ressonância e obtenção de um híbrido de ressonância. No trecho abaixo, observamos uma relação entre diferentes possibilidades da sobreposição de orbitais híbridos e a formação de ligações σ e π e seus comprimentos característicos.

Nas ligações σ , a densidade eletrônica está concentrada entre os dois átomos e em uma linha que une os dois átomos. As ligações duplas ou triplas ocorrem pela sobreposição lateral dos orbitais, dando origem às ligações π . Nas ligações π , a densidade eletrônica também se concentra entre os átomos, mas em ambos os lados da linha que une os átomos. (...) as ligações π apenas encurtam os comprimentos das ligações (Lee, 1996, p. 87, tradução nossa⁵⁸).

Por fim, em duas URT foram identificadas compromissos característicos da terceira zona para explicar a *hipervalência* em alguns compostos. Nesses exemplos,

⁵⁷ The majority of the compound are four covalent (...) all four outer electrons take part in bonding. In the valence bond theory this is explained by promoting electrons from the ground state to an excited state. The energy needed to unpair and promote the electron is more than repaid by the energy released on forming two extra covalent bonds. The distribution of the four orbitals (...) consistent with a sp^3 hybridization.

⁵⁸ In σ bonds the electron density is concentrated in between the two atoms, and on a line joining the two atoms. Double or triple bonds occur by the sideways overlap of orbitals, giving π bonds. In π bonds the electron density also concentrate between the atoms, but on either side of the line joining the atoms. (...) π bonds merely shorten the bond lengths.

tal possibilidade advém da formação de orbitais hibridizados da combinação de orbitais *s*, *p* e *d*, como para o caso de compostos com quatro ou seis átomos ligados aos átomos de enxofre, selênio, telúrio e polônio. O autor destaca que isso não ocorre com o átomo de oxigênio, do mesmo grupo na tabela periódica, mas da segunda camada e que, portanto, não possui orbitais *d* disponíveis para realizar mais que duas ligações.

O oxigênio nunca é mais do que divalente porque ao formar duas ligações covalentes atinge uma configuração de gás nobre e não há orbitais de baixa energia que possam ser usados para formar ligações adicionais. No entanto, os elementos S, Se, Te e Po possuem orbitais *d* vazios que podem ser usados para ligação, e podem formar quatro ou seis ligações a partir dos elétrons desemparelhados (Lee, 1996, p. 82, tradução nossa⁵⁹).

Nesse trecho analisado, observamos uma combinação de concepções distintas da LC, tomadas em um mesmo contexto. A formação da ligação é concebida como o compartilhamento de elétrons que possibilita alcançar a configuração eletrônica de um gás nobre, característico da segunda zona, mas também como resultado da sobreposição de orbitais. Essas concepções são estabilizadas por compromissos epistemológicos e ontológicos incompatíveis, e seu uso indiscriminado pode se relacionar com obstáculos a processos de ensino-aprendizagem das especificidades dessas diferentes abordagens (Rozentaliski, 2013).

Como considerações acerca da seção, temos que as URT analisadas apresentam os principais compromissos que estabilizam a terceira zona do PC da LC e traz importantes relações com outros conceitos para explicar diferentes contextos. A apresentação e discussão desses compromissos e de alguns conceitos importantes, como ressonância e hibridização, em um momento específico da obra nos parece uma interessante estratégia para apresentar as principais especificidades dessa concepção.

Trouxemos, ao longo da discussão, uma URT em que identificamos uma mistura indiscriminada de compromissos e conceitos advindos de maneiras diferentes de conceber a LC. Também vale destacar uma URT em que traz uma *comparação* entre diferentes teorias (Lewis e TLV) para explicar uma mesma questão: a geometria característica da molécula de pentacloreto de fósforo (PCl₅). Em um primeiro

⁵⁹ Oxygen is never more than divalent because when it has formed two covalent bonds it has attained a noble gas configuration, and there are no low energy orbitals which can be used to form further bonds. However, the elements S, Se, Te and Po have empty *d* orbitals which may be used for bonding, and they can form four or six bonds by unpairing electrons.

momento, a geometria é explicada relacionando-a com VSEPR: “Essas moléculas têm uma geometria de bipirâmide trigonal (...) como previsto a partir da teoria de VSEPR para cinco pares de elétrons” (Lee, 1996, p. 497, tradução nossa⁶⁰). No mesmo trecho, apresenta a explicação agora a partir da abordagem da TLV, mostrada na Figura 14.

Nesse trecho, o autor apresenta e diferencia as possibilidades de explicação de duas teorias distintas, e como essas diferenças estão atreladas aos compromissos epistemológicos e ontológicos que estabilizam o conceito da LC. Com isso, temos uma comparação que pode ajudar na compreensão das especificidades da segunda e terceira zona do PC, bem como trazer contextos de aplicabilidade para ambas.

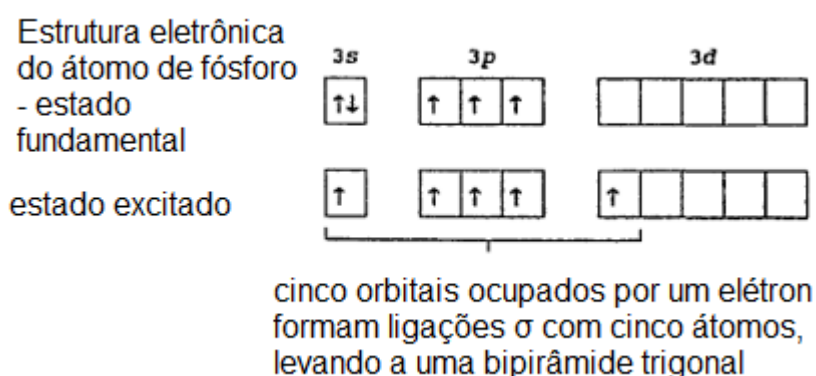


Figura 14 – Distribuição eletrônica para o átomo de fósforo nos estados fundamental e excitado, a partir dos fundamentos da TLV.

Fonte: Adaptado de Lee, 1996, p. 497.

5.2.3.3 A quarta zona do PC da LC na obra “Advanced Inorganic Chemistry”

Com relação às concepções de LC características da quarta zona do PC, tivemos o maior número de URT (39) identificadas, com cinco contextos de aplicação, mostrados na Tabela 13.

Tabela 13 - Usos e contextos de aplicação da quarta zona do PC da LC, na obra “Concise Inorganic Chemistry”.

Contexto	Unidades de Registro Identificadas
Força e comprimento de ligações	13
Formação de ligações e estabilidade dos compostos	11

⁶⁰ These molecules have a trigonal bipyramid shape (...) as expected from the VSEPR theory for five pairs of electrons. The valence bond explanation of the shape is:

Natureza da ligação	6
Compostos deficientes em elétrons	6
Paramagnetismo/diamagnetismo	3
Total = 39	

Fonte: elaboração própria.

Em seis URT foram identificadas explicações acerca da *natureza da ligação*, a partir da formação de um orbital molecular deslocalizado por todo o sistema molecular. O orbital molecular é formado a partir da sobreposição de orbitais atômicos, com sua função de onda como resultado da combinação das funções de onda desses orbitais, podendo ocorrer contribuições construtivas, quando em fase, e destrutivas, quando fora de fase. São também apresentados os princípios para a aplicação da CLOA e o cálculo da ordem de ligação a partir desta. Com isso, identificamos importantes compromissos epistemológicos e ontológicos e também explicações acerca de importantes conceitos relacionados com a concepção da LC característica da quarta zona.

Da aplicação dessa concepção, temos que contexto em que mais emerge foi em explicações acerca do *força e comprimento de ligações*, com 13 ocorrências ao longo da obra. Nessas explicações, o comprimento é relacionado com a distância entre os núcleos dos átomos quando a energia do orbital molecular ligante é mínima. A ordem de ligação é calculada para as moléculas a partir da aplicação dos princípios da CLOA e, dela, pode-se prever características quanto à força e o comprimento das ligações. No exemplo abaixo, temos essas características debatidas para o caso do íon molecular nitrosênio (NO^+): “a remoção de um elétron para formar NO^+ resulta em uma ligação mais curta e mais forte porque o elétron é removido de um orbital antiligante, aumentando assim a ordem da ligação para 3” (Lee, 1996, p.110, tradução nossa⁶¹). Além disso, ligações com maior ou menor BDE também podem ser associadas com orbitais moleculares ligantes ou antiligantes ocupados por elétrons do sistema molecular.

A *estabilidade de compostos* foi explicada a partir da terceira concepção de LC em 11 trechos. A natureza da estabilidade é aqui explicada em termos de um *abaixamento na energia* do sistema. Isso se dá quando os orbitais moleculares

⁶¹ Removal of one electron to make NO^+ results in a shorter and stronger bond because the electron is removed from an antibonding orbital, thus increasing the bond order to 3.

ocupados pelos elétrons se encontra em um estado de energia menor do que quando comparado com os orbitais atômicos que o formaram. Como exemplo, temos o trecho que explica a formação da ligação no boro molecular (B_2), a partir de processos de atração e repulsão, estabilização e desestabilização:

B é um átomo leve e a ordem das energias dos orbitais moleculares é diferente do arranjo “normal”. Assim, os orbitais π_{2p} têm energia mais baixa do que σ_{2px} . Como π_{2py} e π_{2pz} são degenerados (idênticos em energia), a regra de Hund se aplica, e cada um é ocupado individualmente. A camada interna não participa da ligação. Os efeitos dos orbitais σ_{2s} ligantes e antiligantes são cancelados, mas a estabilização ocorre a partir de π_{2p} e, portanto, uma ligação é formada e B_2 existe (Lee, 1996, p. 101, tradução nossa⁶²).

Compostos considerados como “*deficientes em elétrons*”, a partir do racionalismo clássico, foram explicados sob a óptica de compromissos característicos da quarta zona do PC da LC, em seis URT ao longo do livro. Para o caso clássico do trifluoreto de boro (BF_3), a deslocalização da ligação dupla pela molécula, a partir do orbital molecular formado da interação dos orbitais atômicos, possibilita explicar as constatações empíricas dessa molécula:

Todas as medidas mostram que os comprimentos das três ligações são idênticos. A antiga explicação da ligação de valência era a ressonância entre três estruturas com a ligação dupla em posições diferentes. A explicação moderna é que a ligação dupla é deslocalizada. Os quatro orbitais atômicos p_z do B e os três átomos de F formam um orbital molecular π de quatro centros cobrindo todos os quatro átomos que contêm dois elétrons de ligação (Lee, 1996, P. 386, tradução nossa⁶³).

Nesse trecho, vemos aqui uma comparação entre possíveis explicações para essa “problemática” a partir de duas concepções distintas, tomadas a partir de diferentes teorias. Nessa comparação, identifica-se os diferentes compromissos epistemológicos e ontológicos considerados de cada abordagem, o que pode auxiliar

⁶² B is a light atom and the order of energies of MOs is different from the ‘usual’ arrangement. Thus the π_{2p} orbitals are lower in energy than the σ_{2px} . since the π_{2py} and π_{2pz} are degenerate (identical in energy), Hund’s rule applies, and each is singly occupied. The inner shell does not participate in bonding. The effects of bonding and antibonding σ_{2s} orbitals cancel but stabilization occurs from the π_{2p} and hence a bond is formed and B_2 exists.

⁶³ All measurements show that the three bonds lengths are identical. The old valence bond explanation of this was resonance between three structures with the double bond in different position. The modern explanation is that the double bond is delocalized. The four p_z atomic orbitals from B and the three F atoms form a four-centre π molecular orbital covering all four atoms which contain two bonding electrons.

na compreensão das especificidades que devem ser tomadas dependendo da concepção adotada e quais contextos são mais adequados para serem aplicadas.

Por fim, as propriedades de *paramagnetismo* e *diamagnetismo* de alguns compostos também foi elucidada a partir da concepção característica da quarta zona, com três URT ao longo do livro. Para esses casos, a partir da CLAO para moléculas, demonstra-se a existência ou não de elétrons desemparelhados em orbitais, o que possibilita prever as propriedades magnéticas. Como exemplo, tem-se o paramagnetismo na molécula de monóxido de nitrogênio (NO), prevista a partir da distribuição eletrônica de seus orbitais moleculares, mostrada na Figura 15, em que observa-se um elétron desemparelhado.

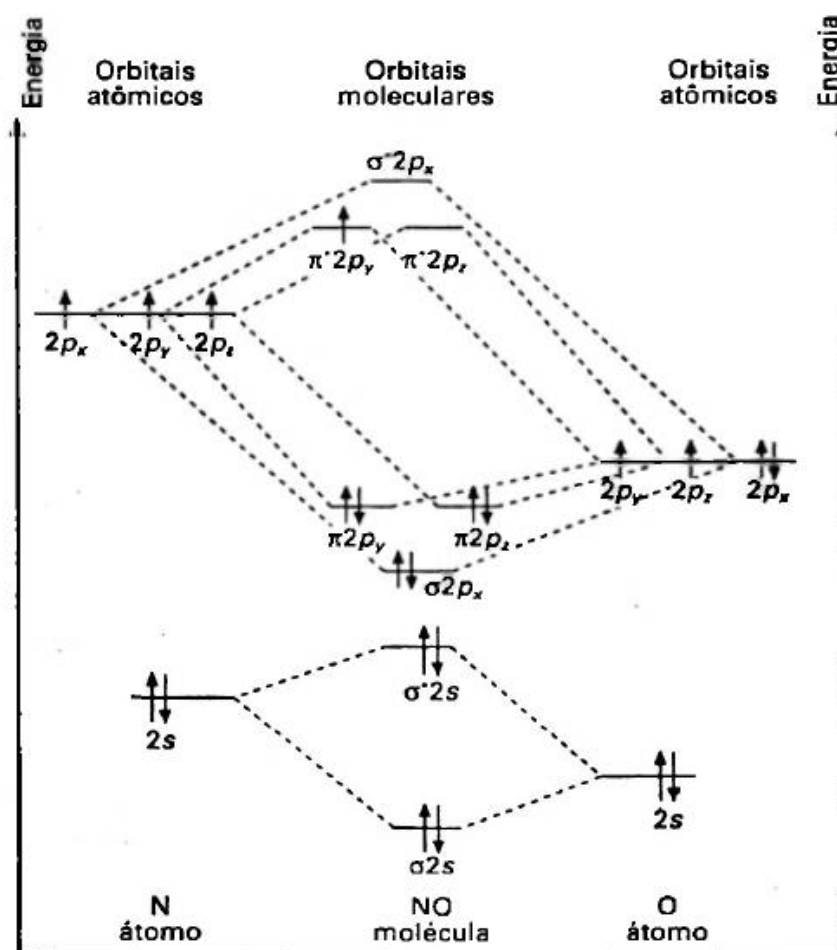


Figura 15 - Configuração eletrônica, orbitais atômicos e moleculares para a molécula de NO.

Fonte: adaptado de Lee (1996, p. 110).

Como considerações acerca das URT características da quarta zona que foram analisadas, temos que essas apresentaram os principais conceitos e compromissos que estabilizam a concepção de LC como um orbital deslocalizado pela molécula. Não foram observados trechos em que essa concepção foi relacionada com conceitos e compromissos advindos de teorias que concebem de maneira distinta a ligação, o que denota uma preocupação do autor em trazer contextos em que suas especificidades fossem consideradas. Além disso, também observa-se trechos em que o autor propõe uma comparação entre maneiras que as concepções características da terceira e da quarta zona podem ser utilizadas, dentro de suas delimitações próprias, para explicar um mesmo contexto.

Em trechos em que essa distinção é observada, entendemos que podem contribuir para que o leitor tome contato com as especificidades de cada caso e também com a multiplicidade de significados em torno do conceito. Assim, auxilia na compreensão que o conceito não é único e especificamente definido, que há mais de uma possibilidade de explicações em alguns casos e que estas podem ser combinadas a fim de elucidar melhor uma problemática ou constatação. Dessa maneira, desde que devidamente distinguidas as características de diferentes concepções, entendemos que há uma contribuição para o domínio do pensamento conceitual do conceito pelo leitor, ao possibilitar entradas que transitam entre diferentes zonas a partir de suas características particulares.

5.2.4 Considerações gerais acerca da análise dos LD, no contexto de ensino-aprendizagem

Nas três obras analisadas, pudemos observar algumas aproximações e afastamentos quanto aos contextos em que emergem as diferentes concepções da LC, os compromissos epistemológicos e ontológicos e a rede de conceitos atrelada a elas. Com isso, pudemos elaborar possíveis considerações acerca de impactos de seus usos em processos de ensino-aprendizagem, tendo em vista as especificidades de cada obra tratadas durante a etapa de análise individual das mesmas.

Quanto à emergência das diferentes concepções, observamos que nos três LD há uma utilização mais frequente da quarta zona, que também é utilizada em uma maior multiplicidade de contextos de explicações. Esses contextos são variados, como explicações acerca de força e comprimento de ligações, geometria de moléculas e estabilidade de compostos. Alguns desses também foram discutidos, ao longo dos

LD, a partir de concepções características das outras zonas do PC, com exceção da primeira, em que foi identificada em um único trecho de todos os analisados para as três obras. Também observa-se que algumas propriedades foram explicadas *exclusivamente* a partir da concepção da quarta zona, como: condutividade elétrica, cor em compostos e paramagnetismo e diamagnetismo.

Essas observações apontam para uma predominância, nesses livros, de abordar a LC e possíveis aplicações a partir de concepções características do *racionalismo contemporâneo* e, também com representável recorrência, do *racionalismo moderno*. Apesar de, em um primeiro momento, isso parecer uma constatação trivial, tendo em vista o público-alvo a qual essas obras se destinam, tem-se que a literatura acerca das concepções de estudantes apresenta dados divergentes: Fernandes (2019) aponta que licenciados de cursos de Química no Ensino Superior concebem a LC preferencialmente a partir do *racionalismo clássico*, sobretudo a partir de ideias realistas da ligação.

A incorporação de abordagens a partir do modelo quântico pode, então, ser uma interessante estratégia para ampliar o potencial de estudantes de apresentar resoluções para uma variedade maior de problemáticas no contexto da Química, sobretudo de ordem submicroscópica e que exigem alto grau de abstração. Com isso, entendemos que as abordagens priorizadas pelos LD se mostram como adequadas a essa estratégia, e apresentam potencial para serem indicados aos estudantes do Ensino Superior de Química visando um melhor domínio dos fundamentos e aplicações das concepções características do modelo quântico.

Por outro lado, também observamos que, em geral, os contextos em que as algumas zonas do PC da LC são explorados se mostraram escassos e restritos muitas vezes a alguns poucos temas, sobretudo a segunda zona. Como exemplo, no livro de Atkins *et. al.* (2010) as concepções características da segunda e terceira zonas são utilizadas, em considerável proporção, para explicar questões de geometria molecular e a partir de um sistema limitado a poucos conceitos. Com isso, entendemos que a compreensão das especificidades de cada concepção, de modo a estabelecer um maior número de relações entre conceitos e teoria, pode ficar comprometido. De mesmo modo, também pode impactar no potencial de estudantes transitarem, de maneira coerente, entre os diferentes modos de conceber a LC e aplica-los em contextos adequados. Em contrapartida, também vale destacar a identificação de trechos, em todos os LD, em que um mesmo contexto era explicado a partir de

diferentes concepções da LC, comparando suas possibilidades de aplicação e compromissos epistemológicos e ontológicos próprios. Comparações assim podem contribuir para a compreensão das especificidades que residem e estabilizam os diferentes significados do conceito, de modo a favorecer a transição entre estes de maneira adequada, a depender do contexto.

Ao longo das obras, observamos alguns poucos trechos em que conceitos advindos de maneiras distintas de conceber a LC foram usados e relacionados de maneira indiscriminada em um mesmo contexto. Essa baixa frequência aponta para a adequação desses LD na promoção de um ensino-aprendizagem que evite obstáculos observados de natureza epistemológica e ontológica, alguns dos principais identificados na compreensão de conceitos polissêmicos no ensino de Ciências (Baltieri; Bego; Cebim, 2021; Vairo; Rezende Filho, 2013). Ainda assim, o contato com esses (poucos) contextos pode reforçar obstáculos desses tipos, sendo interessante a leitura crítica dessas obras.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Esta pesquisa teve como foco central que orientou todas suas etapas mapear as diferentes maneiras de se pensar sobre o conceito da LC em contextos de ensino-aprendizagem no Ensino Superior.

Para tanto, a pesquisa em um primeiro momento foi desenvolvida de modo a identificar os modos característicos do pensamento verbal da LC dentro do domínio microgenético, a partir de um questionário aplicado a alunos de diferentes cursos de Química no estado de São Paulo. A partir de relações entre esses modos e aqueles levantados por Baltieri (2020) em sua exploração dos domínios ontogenético e sociocultural, foi possível estabelecer as zonas do PC da LC, estabilizadas por compromissos epistemológicos e ontológicos que dialogavam entre os três domínios investigados.

A aplicação e análise das respostas ao questionário se mostrou como uma interessante ferramenta para levantar diferentes concepções de LC por estudantes em situações de microprocessos. Com isso, foi possível observar e analisar como os estudantes transitam entre essas diferentes concepções, quais compromissos epistemológicos e ontológicos lançam mão para explicar e resolver os problemas propostos e como relacionam conceitos advindos de diferentes teorias e concepções da ligação química e covalente.

Dois dos principais fatores que podem ser apontados na contribuição para o estabelecimento de fortes relações entre os compromissos identificados nos diferentes domínios genéticos: a multiplicidade de contextos de aplicação do conceito da LC ao longo das respostas e a pluralidade e diversidade dos participantes que participaram dessa etapa da pesquisa.

Quanto ao primeiro fator citado, temos que as perguntas do questionário foram elaboradas de forma a apresentar propriedades ou características de átomos, moléculas ou compostos que podiam ser explicados a partir de princípios das diferentes teorias da ligação química. Algumas dessas perguntas foram elaboradas a partir de problemáticas históricas que marcaram pontos de revolução na história da Química e do conceito da LC, como o caso do paramagnetismo observado na molécula de oxigênio. Em outras perguntas, de caráter mais generalizado e aberto, foi possibilitado aos estudantes descrever como entendiam a ligação química e

covalente, de modo a identificar quais compromissos eles acessavam e com quais conceitos principais relacionavam.

Já com relação ao segundo fator apontado, temos que os respondentes do questionário constituem um grupo significativamente diversificado e plural. Ao compararmos com a coleta e análise de dados nesse domínio feito por Baltieri (2020), pudemos aplicar o questionário a um número muito superior de respondentes, e também de diferentes cursos de Química, visando uma pluralidade maior concebida. Nas respostas, pudemos observar que um número maior de concepções da LC foi utilizado pelos estudantes, além de conceitos e compromissos característicos, em comparação com aqueles identificados por Baltieri (2020). Assim, temos um fortalecimento no estabelecimento nas relações, aproximações e afastamentos que pudemos traçar entre estes compromissos e aqueles identificados nos demais domínios genéticos pelo autor.

Com esses fatores apresentados, concluímos que a primeira etapa da pesquisa possibilitou o estabelecimento de zonas do PC da LC como formas características de se conceber, no pensamento verbal, esse conceito. Essas zonas se mostram distintas epistemologicamente e ontologicamente e representam, de maneira adequada e coerente, a polissemia em torno do conceito.

Com tal estabilização para o PC, temos que este se constitui de uma ferramenta com potencial heurístico na análise e planejamento em diferentes contextos de ensino-aprendizagem de Ciências. As zonas, constituídas por compromissos e articuladas a conceitos característicos, podem ser expressas de maneira enunciativa e também identificadas em discursos dentro desses contextos. Com isso, a segunda etapa de nossa pesquisa buscou explorar o potencial do PC da LC justamente em um contexto de ensino-aprendizagem de Ciências com significativo impacto no Ensino Superior de Química, mas que não frequentemente é explorado no Programa de Pesquisas sobre PC para esse fim: o uso de LD.

Para essa etapa da pesquisa, critérios foram definidos para elencar quais LD fariam parte do *corpus* de coleta de dados e análise, de modo que tais fossem significativamente relevantes em cursos de Ensino Superior de Química. Com os critérios definidos e contemplados, passou-se para a etapa de identificar os compromissos que estabilizavam as diferentes concepções da LC em trechos desses livros, a partir das zonas do PC da LC.

A análise das concepções utilizadas, os conceitos a elas correlacionados e contextos de aplicação, foi possível traçar importantes apontamentos que relacionam as obras analisadas e processos de ensino-aprendizagem do conceito de LC. Nesta seção, vamos destacar três destes apontamentos e como podem impactar esses processos.

Um primeiro apontamento reside no predomínio, observado nos livros, por explicar importantes características de moléculas e compostos a partir de concepções da LC advindas do racionalismo moderno e contemporâneo. Vemos como uma interessante estratégia a utilização desses livros, em contextos de ensino-aprendizagem, visando favorecer a compreensão e utilização adequada dessas concepções, tendo em vista que isto se mostra como uma limitação para muitos estudantes (Baltieri, Bego, Cebim, 2021; Fernandes, 2019).

Já nosso segundo apontamento advém do uso indiscriminado, em algumas das URT analisadas, de conceitos advindos de diferentes concepções da LC. Tal uso pode impactar na constituição e no reforço de obstáculos de natureza epistemológica e ontológica ao ensino da LC (Rozentaliski, 2013; Vairo, Rezende Filho, 2013).

Como terceiro apontamento, temos que os LD adotam alguns poucos contextos para explorar as zonas do PC, com exceção da quarta. Além disso, nesses contextos em geral essas concepções são atreladas a uma rede limitada de conceitos, o que pode dificultar no estabelecimento de relações e discussões mais aprofundadas por estudantes.

Tendo em vista as considerações gerais acerca das diferentes fontes de dados e como foram analisados, podemos destacar a importância do papel do PC da LC como ferramenta para investigar e planejar processos de ensino-aprendizagem.

Como caráter investigativo, o perfil se mostrou de grande utilidade para analisar a adequação e coerência de contextos em que diferentes concepções eram utilizadas, bem como da rede de conceitos atrelada. De maneira similar, temos que se constitui de uma ferramenta com potencial para se pensar processos de ensino que considerem as especificidades e a contextualização, de acordo com aspectos como temática a ser trabalhada, conhecimentos prévios dos estudantes e suas principais CA. Com isso, intervenções baseadas no perfil podem se valer das delimitações que marcam suas zonas para pensar a escolha de metodologias e abordagens adequadas, de forma a reforçar seus aspectos principais e diferenciá-las a partir de paradigmas (Santos, Santos, 2023). A contextualização histórica de teorias e

concepções, considerações acerca de sua polissemia, CA e proposta em uma abordagem mais plural e multifacetada, se mostram como trunfos do uso do PC da LC na resolução de problemáticas históricas atreladas ao ensino tradicional desse conceito e os obstáculos que este leva.

Assim, temos que a atual pesquisa contribui para o Programa de Pesquisas em PC e para o ensino de Ciências como um todo, fornecendo uma ferramenta com interessantes potencialidades em investigações e planejamento de ensino. Como perspectivas futuras, sugere-se a aplicação do PC da LC em mais contextos de ensino-aprendizagem, sobretudo dentro de aula de Ciências, de forma a investigar interações entre professor e alunos na construção do conhecimento em torno do conceito e sua polissemia.

REFERÊNCIAS:

AMARAL, E. M. R. DO; MORTIMER, E. F. Uma Proposta de Perfil Conceitual para o Conceito de Calor. **Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 1, n. 3, p. 5-18, 2001.

ATKINS, P.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLEW, M.; ARMSTRONG, F. HAGEMAN, M. **Shriver & Atkins Inorganic Chemistry**. 5. ed., New York: W. H. Freeman and Company. 2010

AUTSCHBACH, J. Orbitals: some fiction and some facts. **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 8, p. 1032-1040, 2012.

BACHELARD, G. **A filosofia do Não: o novo espírito científico: a poética do Espaço**. Abril Cultural, 1979.

BALTIERI, R. S. **As naturezas da ligação covalente: uma proposta de perfil conceitual**. Dissertação (Mestrado em Química). Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, Campus de Araraquara. 2020. Disponível em: <https://repositorio.unesp.br/handle/11449/193137>. Acesso em 10 out. 2021.

BALTIERI, R. S.; BEGO, A. M.; CEBIM, M. A. Why the covalent bond is such a complex concept: a conceptual profile proposal. **International Journal of Science Education**, v. 43, n. 12, p. 2007-2024, 2021.

BASTOS, P. W.; MATTOS, C. R. Um exemplo da dinâmica do perfil conceitual como complexificação do conhecimento. **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 8, n. 3, p. 1054–1078, 2009. Disponível em: http://reec.educacioneditora.net/volumenes/volumen8/ART16_Vol8_N3.pdf. Acesso em 12 jun. 2020.

COUTINHO, F. A. **Construção de um perfil conceitual de vida**. Tese (Doutorado em Educação). Faculdade de Educação, Universidade Federal de Minas Gerais. Belo Horizonte, 2005. Disponível em: <https://repositorio.ufmg.br/handle/1843/FAEC-85RHZ8>. Acesso em 14 out. 2021.

COUTINHO, F. Â.; EL-HANI, C. N.; MORTIMER, E. F. Building a profile for the biological concept of life. In: **Conceptual profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. A theory of teaching and learning scientific concepts. Springer Science & Business Media, 2014 . p. 115-142.

COTTON, F. A.; WILKSON, GEOFFREY; MURILLO, C.A.; BOCHMANN, M. **Advanced Inorganic Chemistry**. 6ª ed. New York: Jon Wiley & Sons. 1999.

DALRI, J. **A Dimensão Axiológica Do Perfil Conceitual**. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010.

DINIZ JÚNIOR, A. I.; AMARAL, E. M. R.; SILVA, J. R. R. T. Relação entre contextos e zonas do perfil conceitual de substância na fala de professores de química. In:

Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 10., 2015, Águas de Lindóia. **Anais ... Águas de Lindóia: [s. n.], 2015.** Disponível em: <http://www.abrapecnet.org.br/enpec/x-enpec/anais2015/resumos/R0328-1.PDF>. Acesso em 11 jan. 2022.

EL-HANI, C. N.; SILVA FILHO, W. J.; MORTIMER, E. F. The Epistemological Grounds of the Conceptual Profile Theory. In: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Ed.). **Conceptual profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts.** Springer Science & Business Media, 2014. p. 35-67.

FERNANDES, L. S. **Conceituação da ligação covalente por licenciandos em química.** Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências). Faculdade de Educação, Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2019.

FREITAS, G.; FERREIRA, A. P. K. L.; BEGO, A. M.; GODOI, D. R. M. Caracterização dos Livros Didáticos adotados para o Ensino de Eletroquímica nos Cursos de Licenciatura em Química nas Universidades Públicas de São Paulo. In: Evento de Educação em Química, 17., 2019, Araraquara. **Anais ... Araraquara: [s.n.], 2019.** Disponível em <https://www.iq.unesp.br/#!/eveq/anais-atualizados/xvii-eveq/>. Acesso em 22 jan. 2021.

GIBBS, G. **Análise de dados qualitativos:** coleção pesquisa qualitativa. Bookman Editora, 2009.

HUND, F. Chemical binding. **Transactions of the Faraday Society**, v. 25, p. 646-648, 1929.

HUND, F.. Early History of the Quantum Mechanical Treatment of the Chemical Bond. **Angewandte Chemie International** (Edition in English), v. 16, n. 2, p. 87–91, 1977.

HUNTER, K. H.; RODRIGUEZ, J. G.; BECKER, N. M. A review of research on the teaching and learning of chemical bonding. **Journal of chemical education**, v. 99, n. 7, p. 2451-2464, 2022.

International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). **Compendium of Chemical Terminology.** 2. ed. Estados Unidos da América, 2014. Disponível em: <https://goldbook.iupac.org/>. Acesso em: 09 jul. 2022.

JACQUES, V. **A Energia No Ensino Fundamental:** o livro didático e as concepções alternativas. Dissertação (Mestrado em Educação Científica e Tecnológica). Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2008. Disponível em: <https://repositorio.ufsc.br/xmlui/handle/123456789/91750>. Acesso em 21 ago. 2023.

LANGMUIR, I. The arrangement of electrons in atoms and molecules. **Journal of the American Chemical Society**, v. 41, n. 6, p. 868-934, 1919.

LEE, J.D. **Concise Inorganic Chemistry.** 5^a ed. London: Chapman & Hall Ltd. 1996.

LEWIS, G. N. The atom and the molecule. **Journal of the American Chemical Society**, v. 38, n. 4, p. 762-785, 1916.

LIMA, T. M. **Aspectos ontológicos e epistemológicos do conceito darwinista de adaptação no discurso pedagógico de biologia no ensino médio**. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências). Universidade Federal da Bahia e da Universidade Estadual de Feira de Santana, Salvador, 2019. Disponível em: <https://philarchive.org/archive/LIMAOE-2>. Acesso em 04 out. 2021.

LIMA, T.M.; SERRA, C.A., EL-HANI, C.N.. Compreendendo a polissemia do conceito darwinista de adaptação em livros didáticos de biologia do ensino médio. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 29, n. 1, p. 92, 2024.

LOPES, R. O. **A evolução do perfil conceitual de átomo por meio de atividades experimentais espectroscópicas**. Dissertação (Mestrado em Educação de Ciências). Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2017. Disponível em: <https://repositorio.ufsm.br/handle/1/13266>. Acesso em 12 out. 2021.

LOZADA, C.O; D'AMBROSIO, U. Considerações sobre o conceito de equação presente nos cadernos do professor e as zonas de perfil conceitual de equação. **Revista Paranaense de Educação Matemática**, v. 7, n. 14, p. 7-38, 2018.

MATTOS, C. R.; RODRIGUES, A. M. Context and discursive activity in physics classroom. *In: European Physics Education Conference*, 8., 2007. Opatija. **Proceedings ...** Rijeka: Faculty of Arts and Sciences. p. 1–9, 2007.

MORALLES, V. A. **Vamos modelar, professor Hélio?:** Desenvolvimento do conhecimento prático-profissional por meio da implementação de uma Unidade Didática Multiestratégica. Tese (Doutorado em Química). Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita filho”, Araraquara, 2021. Disponível em: https://repositorio.unesp.br/bitstream/handle/11449/215847/morales_va_dr_araiq_int.pdf?sequence=3&isAllowed=y. Acesso em 24 fev. 2022.

MORI, R.C.; SANTOS, J.A.L., KLEIN, G.N.; STEFANO, W. A contextualização histórica da evolução em livros didáticos de Ciências. **História da Ciência e Ensino: construindo interfaces**, v. 21, p. 87-102, 2020.

MORTIMER, E. F. Conceptual change or conceptual profile change? **Science & Education**, v. 4, n. 3, 1995. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00486624>. Acesso em 24 de abr. 2020.

MORTIMER, E. F. Construtivismo, mudança conceitual e o ensino de ciências: Para onde vamos? **Investigações em ensino de ciências**, v. 1, n.1, p. 20–39, 1996. Disponível em: https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/1611981/mod_resource/content/2/mortimer.pdf. Acesso em 04 abr. 2020.

MORTIMER, E. F. **Linguagem e formação de conceitos no ensino de ciências**. Belo Horizonte: Editora UFMG. 2000.

MORTIMER, E. F. Perfil conceptual: formas de pensar y hablar em las classes de ciências. **Infancia y Aprendizaje**, v. 24, p. 475–490, 2001. Disponível em: <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1174/021037001317117402>. Acesso em 04 abr. 2020.

MORTIMER, E. F.; AMARAL, L. O. F. Contributions of the Sociocultural Domain to Build a Conceptual Profile Model for Molecule and Molecular Structure. In: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Ed.). **Conceptual profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. Springer Science & Business Media, 2014. p. 103-114.

MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. Uma visão sócio-interacionista e situada dos conceitos e a internalização em Vygotsky. In: Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 9., 2013, Águas de Lindóia. **Anais ... Águas de Lindóia: [s. n.]**, 2013. Disponível em: http://abrapecnet.org.br/atas_enpec/ixenpec/atas/resumos/R0761-1.pdf. Acesso em 12 jan. 2022.

MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Ed.). **Conceptual profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. Springer Science & Business Media, 2014.

MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N.; SEPULVEDA, C.; AMARAL, E. M. R.; COUTINHO, F. A.; RODRIGUES & SILVA, F. A. Methodological Grounds Of The Conceptual Profile Research Program. In: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Ed.). **Conceptual profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. Springer Science & Business Media, 2014. p. 67 – 100.

MORTIMER, E. F.; SCOTT, P. Atividades discursivas nas salas de aula de ciências: uma ferramenta sociocultural para analisar e planejar o ensino. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 7 , p. 283–306, 2002.

MORTIMER, E. F.; SCOTT, P.; AMARAL, E. M. R.; EL-HANI, C. N. Conceptual Profiles: Theoretical-Methodological Bases of a Research Program. In: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Ed.). **Conceptual profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. Springer Science & Business Media, 2014a. p. 3 – 35.

MORTIMER, E. F.; SCOTT, P.; EL-HANI, C. N. Bases teóricas e epistemológicas da abordagem dos perfis conceituais. **Tecné, Episteme y Didaxis: TED**, n. 30, 2011.

MOURA, E. A.; MATA, M. S.; PAULINO, P.R.V; FREITAS, A. P MOURÃO JÚNIOR, C.A.; MÁRMORA, C.H.C. Os planos genéticos do desenvolvimento humano: a contribuição de Vigotski. **Revista Ciências Humanas - Educação e Desenvolvimento Humano – UNITAL**, Taubaté, v. 9, n 1, edição 16, p. 106 - 114, 2016. Disponível em: https://www.researchgate.net/profile/Pedrita-Paulino/publication/337054462_OS_PLANOS_GENETICOS_DO_DESENVOLVIMENTO_HUMANO_A_CONTRIBUICAO_DE_VIGOTSKI/links/5f86164492851c14bcc6939f/OS-PLANOS-GENETICOS-DO-DESENVOLVIMENTO-HUMANO-A-CONTRIBUICAO-DE-VIGOTSKI.pdf. Acesso em 11 abr. 2021.

MULLIKEN, R. S. The path to molecular orbital theory. **Pure and Applied Chemistry**, v. 24, n. 1, p. 203-215, 1970.

OLIVEIRA, M. K. **Vygotsky: aprendizado e desenvolvimento – um processo sócio-histórico**. Ed. Scipione. 1993.

PAULING, L. The nature of the chemical bond. 3. ed. Nova York: Cornell University Press, 1960.

PICÓN, R. O.; SEVIAN, H.; MORTIMER, E. F. Conceptual Profile of Substance. **Science and Education**, v. 29, n. 5, 2020.

POSNER, G. J.; STRIKE, K.A; HEWSON, P.W.; GERTZOG, W.A. Toward a theory of conceptual change. **Science education**, v. 66, n. 2, p. 211-227, 1982.

REIS, V. P. G. S. **Um perfil conceitual de herança biológica: investigando dimensões epistemológicas e axiológicas de significação do conceito no contexto do ensino médio de genética**. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências). Universidade Federal da Bahia e da Universidade Estadual de Feira de Santana, Salvador, 2018. Disponível em: https://ppgefhc.ufba.br/sites/ppgefhc.ufba.br/files/tese_vanessa_reis_versao_final_para_homologacao.pdf. Acesso em 12 mar. 2022.

REZENDE, R. D. F. **A elaboração de estratégias de ensino a partir das zonas do perfil conceitual de vida**. Dissertação (Mestrado em Educação em Ciências e Matemática). Universidade Federal de Goiás. Goiânia, 2019. Disponível em: <http://repositorio.bc.ufg.br/tede/handle/tede/10135>. Acesso em 01 dez. 2021.

ROZENTALSKI, E.F. **O estatuto ontológico e epistemológico do conceito de orbital em livros Didáticos de Química Geral no Séculos XX: uma análise de seus fundamentos, suas representações e implicações para a aprendizagem**. 2013. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências). Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. Disponível em: https://www.academia.edu/download/33632002/Dissertacao_Evandro_F_Rozentalski_-definitiva-.pdf. Acesso em 14 jan. 2025.

SANTOS, J. P. M. D.; SANTOS, B. F. D. Diretrizes para planejamento do ensino de ciências baseado na teoria dos perfis conceituais. **Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 25, p. e40890, 2023. Disponível em <https://doi.org/10.1590/1983-21172022240134>. Acesso em 09 dez. 2024.

SEPULVEDA, C. **Perfil conceitual de adaptação: uma ferramenta para a análise de discurso de salas de aula de biologia em contextos de ensino de evolução**. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História da Ciências). Universidade Estadual de Feira de Santana, Feira de Santana, 2010.

SILVA, J. L. P. B; ROQUE, N. F. Teoria da ressonância: história e ensino. In: FREIRE JR., O.; PESSOA JR., O.; BROMBERG, J. L. (org.). **Teoria quântica: estudos históricos e implicações culturais**. Campina Grande: EDUEPB; São Paulo: Livraria da Física, 2011. 456 p. Disponível em:

https://www.researchgate.net/publication/331914416_Teoria_da_ressonancia_historia_e_ensino. Acesso em 02 ago. 2022.

SODRÉ, F. C. R. **Física para uma alimentação saudável**. São Paulo: Universidade de São Paulo, 6 jul. 2018.

SOUZA, I. L. N. **A construção coletiva da ligação covalente por Linus Pauling, Gilbert N. Lewis, Irving Langmuir**: um estudo sobre a emergência de um fato científico. Dissertação (Mestrado em Educação em Ciências e em Matemática). Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2020. Disponível em: <https://www.acervodigital.ufpr.br/handle/1884/68899>. Acesso em 05 ago. 2022.

VIGGIANO, E.; MATTOS, C. R. A Construção de um Instrumento para o Levantamento do Perfil Conceitual de Ensinar e Aprender. *In*: Simpósio Nacional de Ensino de Física, 17., 2017, São Luís. **Atas...** São Luís: SBF, 2007. Disponível em: <http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/snef/xvii/atas/listaresumos.htm>. Acesso em 19 maio 2020.

VAIRO, A. C.; REZENDE FILHO, L.A.C. Conceptual Profile As A Research Subject And Its Application In Topics Of Biology. **Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 15, n. 1, p. 193-208, 2013.

VYGOTSKY, L. **Pensamento e Linguagem**. 10^a ed. Petrópolis: Vozes. 2001.

WERTSCH, J. V. **Vygotsky and the social formation of mind**. Harvard university press, 1985.

ANEXO – QUESTIONÁRIO

Idade:	Ano de entrada no curso:
Orientações para responder o questionário: • As perguntas devem ser respondidas sucintamente conforme ordem crescente apresentada; • Ao avançar para a próxima pergunta, não modifique as respostas anteriores; • Responda com caneta.	

1 – O que é ligação química?

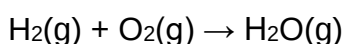
2 – O que é ligação covalente?

3 – Considere os seguintes símbolos:

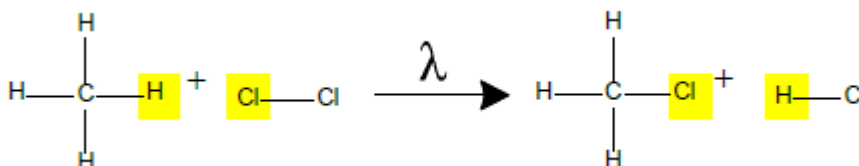
Hidrogênio (H): $\bigcirc$

Oxigênio (O): $\oplus$

Reescreva e balanceie a seguinte equação química utilizando os símbolos acima:



4 – Analisando a equação que representa a reação de substituição a seguir, explique por que essa reação ocorre. Não há necessidade de fazer o mecanismo.



5 – Considerando os grupos de elementos a seguir, indique o que é possível determinar como algo comum a todos de um mesmo grupo.

Grupo A	Oxigênio (O), enxofre (S), cálcio (Ca), magnésio (Mg) e ferro (Fe).
Grupo B	Hidrogênio (H), cloro (Cl), flúor (F), bromo (Br), sódio (Na) e potássio (K).
Grupo C	Boro (B), alumínio (Al) e ferro (Fe).
Grupo D	Carbono (C), silício (Si) e chumbo (Pb).

6 – Escreva a fórmula de cada uma das seguintes substâncias, utilizando o modelo que mais achar adequado:

H₂O

C₆H₆



7 – A estrutura da molécula de benzeno recebeu várias sugestões quando ainda não se conhecia muito sobre a natureza do elétron. Hoje em dia sabemos que se trata de uma estrutura fechada e que não possui distinção (energética e de distância) entre as ligações carbono-carbono. Como é possível explicar esse fenômeno utilizando modelos de ligação química? Disserte.

8 – Ao aproximarmos oxigênio (O_2) líquido de um equipamento com um campo magnético, esta substância interage atrativamente com o aparato. Levando em consideração seus conhecimentos sobre ligações químicas, como você explicaria esse fenômeno?

9 – Podemos considerar que a molécula de água é composta por um átomo de oxigênio ligado a dois átomos de hidrogênio:



No entanto, experimentalmente, sabemos que a molécula de água tem comportamento polar. Levando em consideração seus conhecimentos sobre ligações químicas, como você explicaria esse comportamento?

10 – Ao longo do questionário você, provavelmente, utilizou vários modelos e teorias diferentes. Sem modificar suas respostas, quais modelos e teorias você é capaz de identificar em todas respostas?

APÊNDICE A – CURSOS DE QUÍMICA NAS INSTITUIÇÕES DE ENSINO SUPERIOR DE SÃO PAULO, DISCIPLINAS ESCOLHIDAS E FORMA DE ACESSO DOS PLANOS DE ENSINO.

Instituição	Curso(s)	Disciplina	Forma de acesso ao plano de ensino das disciplinas
Instituto de Química — USP — Campus de São Paulo	Bacharelado em Química	Química Inorgânica I:	https://uspdigital.usp.br/jupiterweb/jupCarreira.jsp?codmnu=8275
	Licenciatura em Química	Química Elementos dos	
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto — USP — Campus de Ribeirão Preto	Bacharelado em Química	Química Inorgânica I	
	Licenciatura em Química		
Instituto de Química de São Carlos — USP — Campus de São Carlos	Bacharelado em Química	Fundamentos da Estrutura Atômica Molecular	
	Licenciatura em Ciências Exatas (com habilitação em Química)		
Instituto de Química — Unicamp	Bacharelado em Química	Química Inorgânica Teórica	https://www.iqm.unicamp.br/gradua%C3%A7%C3%A3o/ementas-e-programas
	Licenciatura em Química		
	Bacharelado em Química Tecnológica		
Instituto de Química — Unesp — Campus de Araraquara	Bacharelado em Química	Química Inorgânica: Estruturas e Propriedades	https://www.iq.unesp.br/#!/graduacao1260/cursos/bacharelado-em-quimica/
	Licenciatura em Química	Química Inorgânica	https://www.iq.unesp.br/#!/graduacao1260/programas-de-ensino/
Faculdade de Ciências — Unesp — Campus de Bauru	Bacharelado em Química Tecnológica	Química Inorgânica I	https://www.fc.unesp.br/Home/Departamentos/quimica201/projeto-politico-pedagogico-

			quimica--- 2903.pdf
--	--	--	---------------------

Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas - Unesp – Campus de São José do Rio Preto	Bacharelado Química	Química Inorgânica	Solicitado pela Seção Técnica de Graduação via e-mail
	Licenciatura em Química		
Faculdade de Ciências e Tecnologia – Unesp – Campus de Presidente Prudente	Licenciatura Química	Química Inorgânica Fundamental	https://www.fct.unesp.br/#!/graduacao/quimica/programas-de-ensino/
Universidade Federal de São Carlos – Campus de São Carlos	Bacharelado Química	Química dos Elementos	http://www.prograd.ufscar.br/cursos/cursos-oferecidos-1/quimica/sao-carlos
	Licenciatura Química		
Universidade Federal de São Carlos – Campus de Sorocaba	Licenciatura Química	Química Inorgânica	http://www.prograd.ufscar.br/cursos/cursos-oferecidos-1/quimica/sorocaba
Universidade Federal de São Carlos – Campus de Araras	Licenciatura Química	Química Inorgânica	http://www.prograd.ufscar.br/cursos/cursos-oferecidos-1/quimica/araras
Universidade Federal do ABC	Bacharelado Química	Ligações Químicas	https://prograd.ufabc.edu.br/catalogos-de-disciplinas
	Licenciatura Química		

Universidade Federal de São Paulo	Bacharelado Química	Fundamentos Química Inorgânica	http://www2.unifesp.br/home_diade_ma/grad/grad_quimica.html
	Licenciatura em Química	Química Inorgânica	http://ciencias.sites.unifesp.br/index.php/curso/projeto-pedagogico
Instituto Federal de São Paulo — Campus de São Paulo	Licenciatura em Química	Química Inorgânica II	https://novospo.spo.ifsp.edu.br/menu/67-menu-principal-graduacao/1713-licenciatura-em-quimica-2

Instituto Federal de São Paulo — Campus de Barretos	Licenciatura em Química	Química Inorgânica I	https://brt.ifsp.edu.br/index.php/cursos/superiores/licenciatura-em-quimica
Instituto Federal de São Paulo — Campus de Matão	Licenciatura em Química	Química Inorgânica I	http://mto.ifsp.edu.br/graduacao/132-licenciatura-em-quimica
Instituto Federal de São Paulo — Campus de Capivari	Licenciatura em Química	Química Inorgânica II	http://www.ifspcapivari.com.br/cursos/licenciatura/quimica/
Instituto Federal de São Paulo — Campus de Catanduva	Licenciatura em Química	Química Inorgânica I	https://ctd.ifsp.edu.br/licenciatura-em-quimica
Instituto Federal de São Paulo — Campus de São José dos Campos	Licenciatura em Química	Química Inorgânica I	https://sjc.ifsp.edu.br/quimica/index.php/editoria-f
Instituto Federal de São Paulo — Campus de Sertãozinho	Licenciatura Em Química	Química Inorgânica II	https://srt.ifsp.edu.br/cursos?id=136

Instituto Federal de São Paulo — Campus de São João da Boa Vista	Licenciatura em Ciências Naturais (com Habilitação em Química)	Química Inorgânica	https://www.sbv.ifsp.edu.br/estrutura-organizacional/estrutura-organizacional-cbi/64-ensino/cursos/136-licenciatura-em-quimica
Instituto Federal de São Paulo — Campus de Suzano	Bacharelado em Química Industrial	Compostos de Coordenação	http://szn.ifsp.edu.br/porta12/index.php?option=com_content&view=article&id=948:bacharelado-em-quimica-industrial&catid=62&Itemid=288
	Licenciatura em Química	Química Inorgânica II	http://szn.ifsp.edu.br/porta12/index.php?option=com_content&view=article&id=276:quimica&catid=62&Itemid=101

Fonte: elaboração própria.

APÊNDICE B: TERMO DE CONSENTIMENTO LIVRE E ESCLARECIDO

Você está sendo convidado para participar da pesquisa “O ensino de ligação covalente no Ensino Superior : uma proposta a partir do programa de pesquisa sobre perfil conceitual” sob responsabilidade de Raul da Costa Casaut (doutorando) e Dr. Amadeu Moura Bego (orientador). 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 identificar como estudantes de cursos de Química do Ensino Superior utilizam diferentes modelos e teorias da ligação química para solucionar problemáticas históricas da Ciência. Para isso, será utilizado um questionário composto por 10 questões, a ser respondido presencialmente pelo estudante durante uma aula cedida pelo professor responsável. A leitura e respostas ao questionário levam em torno de 40 minutos a uma hora. Não há quaisquer custos para participar dessa pesquisa, e é de sua total vontade a participação ou não dessa pesquisa, sem quaisquer consequências pela opção de não participar da mesma. Você tem o direito de solicitar esclarecimentos sobre os procedimentos, antes e durante a realização da pesquisa

Toda pesquisa oferece riscos, neste caso os riscos podem estar relacionados com momentos de constrangimento ou timidez para responder as questões. Para que não ocorram ou, caso no de ocorrerem, tomaremos os seguintes cuidados e providências: não será feita nenhuma forma de identificar os participantes da pesquisa; as respostas às questões desse questionário visam identificar como os estudantes utilizar diferentes conceitos e modelos, sem se preocupar em respostas “corretas” ou “erradas”, priorizando que alunos respondam da maneira que se sentirem mais à vontade. Os dados resultantes dessa pesquisa serão armazenados de maneira privada pelos responsáveis, sendo divulgados de maneira anônima qualquer resposta obtida. 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.

Com a presente pesquisa, espera-se contribuir para a área de ensino de ciências, a comunidade científica e escolar, na escolha reflexiva de métodos de ensino que priorizem a pluralidade de concepções acerca da ligação covalente e que possibilitem a resolução de problemas que envolvam conceitos correlatos. Ao participante, será possível refletir sobre o entendimento que traz acerca de diferentes teorias da ligação química, os conceitos envolvidos, alcances e limites de cada uma delas e como podem ser utilizados na resolução de problemáticas e entendimento de outros conceitos na Química.

Os dados resultantes deste estudo serão apresentados em uma tese de doutorado, observando os princípios éticos da pesquisa científica e seguindo procedimentos de sigilo e descrição. Os dados não serão divulgados de forma a possibilitar sua identificação e serão todos armazenados exclusivamente em computador pessoal dos responsáveis, garantindo a privacidade, o sigilo, a confidencialidade e o anonimato do participante, sem qualquer registro em qualquer plataforma virtual, ambiente compartilhado ou "nuvem". Não haverá benefícios ou contribuições financeiras sobre os resultados decorrentes da pesquisa.

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

Pesquisador Responsável
Nome: Raul da Costa Casaut
Tel:
Endereço:
E-mail:

Orientador
Prof. Dr. Amadeu Moura Bego
Endereço:
Tel:
E-mail:

Localização: Rodovia Araraquara-Jaú, Km 1 – Caixa Postal 174 – CEP: 14800-901 – Araraquara – SP – Fone: (16) 3334-6263 – endereço eletrônico: comitedeetica@fclar.unesp.br.