

RICARDO SANTOS BALTIERI

**AS NATUREZAS DA LIGAÇÃO COVALENTE:
UMA PROPOSTA DE PERFIL CONCEITUAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química do Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Química.

Orientador: Prof. Dr. Amadeu Moura Bego
Coorientador: Prof. Dr. Marco Aurélio Cebim

Araraquara, SP
2020

FICHA CATALOGRÁFICA

B197a Baltieri, Ricardo Santos
As naturezas da ligação covalente: uma proposta de
perfil conceitual / Ricardo Santos Baltieri. –
Araraquara: [s.n.], 2020
123 f.: il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista,
Instituto de Química

Orientador: Amadeu Moura Bego

Coorientador: Marco Aurélio Cebim

1. Ciência - Estudo e ensino. 2. Ligações químicas.
3. Epistemologia. 4. Revisão. 5. Questionários. I. Título.



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Câmpus de Araraquara



CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "As naturezas da Ligação Covalente: uma proposta de Perfil Conceitual"

AUTOR: RICARDO SANTOS BALTIERI

ORIENTADOR: AMADEU MOURA BEGO

COORDENADOR: MARCO AURELIO CEBIM

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

Prof. Dr. MARCO AURELIO CEBIM

Departamento de Química Geral e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Prof. Dr. LUIZ ANTONIO ANDRADE DE OLIVEIRA

Departamento de Química Geral e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Profª Drª EDENIA MARIA RIBEIRO DO AMARAL

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

Araraquara, 28 de fevereiro de 2020

DADOS CURRICULARES

IDENTIFICAÇÃO

Nome: Ricardo Santos Baltieri

Nome em citação bibliográfica: Baltieri, R. S.

FORMAÇÃO ACADÊMICA

Graduação em Licenciatura em Química na Universidade Estadual Paulista-Unesp, no Instituto de Química de Araraquara-Concluído em 2017.

PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS:

1. XVI Evento de Educação em Química. **“Levantamento bibliográfico sobre concepções alternativas relacionadas à ligação química no Ensino Superior”**, 2018, Araraquara – SP.
2. X Encontro Paulista de Pesquisa em Ensino de Química. **“Concepções de candidatos a um programa de mestrado em química sobre parâmetros de estabilidade da ligação iônica”**, 2019, Araraquara – SP.
3. II Seminário sobre Perfis Conceituais. **“Contribuições da revisão sistemática para pesquisas sobre perfil conceitual”**, 2019, Recife – PE.
4. XVII Evento de Educação em Química. **“O que pensam os candidatos a um curso de doutorado em Química sobre os parâmetros de estabilidade de uma ligação iônica”**, 2019, Araraquara – SP.

AGRADECIMENTOS

Ao Instituto de Química da UNESP Araraquara por toda minha formação pessoal e acadêmica.

Ao Prof. Dr. Amadeu Moura Bego pela excelente orientação em todo o percurso deste mestrado, por se mostrar um exemplo de profissional e pela eterna amizade. Especialmente pela paciência e dedicação em ajudar nos períodos mais difíceis.

Ao Prof. Dr. Marco Aurélio Cebim por toda paciência em me mostrar os caminhos para seguir no meio de tantas funções, equações, modelos e teorias. Obrigado por tanta dedicação e carinho pela profissão.

Aos Professores Dra. Edenia Maria Ribeiro do Amaral e Dr. Gustavo Troiano Feliciano pelas grandes contribuições e disponibilidade durante o processo de Qualificação.

A todos meus familiares, por compreender meus momentos de ausência e sem os quais nada disso seria possível. Em especial aos meus avós Catarina e José Djalma que sempre acreditaram que eu chegaria longe. Aos meus pais Gisleine e Darci pela minha vida. À minha tia Patricia por todo suporte nos momentos difíceis. Às minhas irmãs e irmão, Camila, Karina e Felipe por toda companhia e aprendizado.

Ao Pedro A. Munari Jr. pela paciência, pelos aprendizados, por ter acreditado o tempo todo em mim e por ser minha melhor companhia.

A todos meus colegas e amigos em nome dos grandes momentos de discussão, descontração e desconstrução. Em especial aos meus amigos-irmãos Lucas e Ailton. Às minhas amigas Xóris, Rafaela, Juliana, Maytte e Geanny. A todos colegas da República Xikerão.

A todos do grupo Rede de Inovação e Pesquisa em Ensino de Química (RIPEQ) pelas discussões e aprendizados.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa (processo número 88882.330030/2019-01) e pelos recursos oferecidos durante este trabalho.

“Com grandes poderes vêm grandes responsabilidades”

– Stan Lee.

RESUMO

O processo de aprendizagem de conceitos científicos tem sido investigado e discutido em diversas pesquisas nacionais e internacionais nas últimas décadas. Todavia, a compreensão sobre esse processo pode ser bastante diferente dependendo da abordagem psicopedagógica adotada. Na perspectiva do perfil conceitual, pode haver diferentes formas de pensar e modos de falar sobre um mesmo conceito, sendo assim, esses modos e formas podem ser organizados em diferentes zonas. Além de compromissos epistemológicos, o modelo também considera os compromissos ontológicos e axiológicos. O perfil conceitual é uma alternativa no ensino de ciências que permite considerar as concepções prévias, identificar diferentes visões de mundo e contribuir para o enriquecimento do vocabulário científico do aluno. Esse modelo reconhece o valor cultural do senso comum, possibilitando ao aluno ter contato com formas mais fundamentadas e complexas de pensamento, capazes de estabelecer mais relações e responder a mais perguntas. Nesse contexto, diversas pesquisas têm sido conduzidas para diversos conceitos científicos a fim de propor seus respectivos perfis conceituais, uma vez que o reconhecimento de determinado perfil possibilita que o aluno compreenda o valor de cada visão segundo o seu contexto e sua base filosófica, assim como perceber que utilizar termos científicos pode ser útil para responder perguntas cada vez mais complexas. Assim, a presente dissertação objetiva propor um perfil conceitual para o conceito de ligação covalente que contemple compromissos epistemológicos e ontológicos. Para isso, foi feita uma revisão narrativa do desenvolvimento histórico do conceito, uma revisão sistemática sobre as concepções alternativas de ligação química reportadas na literatura e a aplicação de um questionário para uma turma de ensino superior em química. As fontes de dados foram escolhidas de forma a analisar o conceito a partir de diferentes domínios genéticos, sendo eles, o sociocultural, o ontogenético e o microgenético. Os dados da revisão narrativa foram divididos em temas epistemológicos e serviram de base para categorizar as concepções encontradas a partir da revisão sistemática e do questionário. Esses resultados foram compilados na forma de uma matriz semântica, apresentando dezenove significados, e transformados em quatro zonas de um perfil conceitual: conectividade indiscriminada, atratividade estabilizadora, remanescência localizada e deslocalização sistemática. A proposta contribui para discutir as abordagens do conteúdo, especificamente, no ensino de química, de modo a considerar sua polissemia e evolução na aprendizagem do aluno, permite também o futuro planejamento de unidades didáticas e análises textuais.

Palavras-chave: Revisão Narrativa, Revisão Sistemática, Questionário, Concepções Alternativas, Matriz Semântica.

ABSTRACT

The learning process of scientific concepts has been investigated and discussed in several national and international studies in recent decades. However, the understanding of this process may be quite different depending on the psychopedagogical approach adopted. From the perspective of the conceptual profile, the same concept can present more than one mode of thinking and way of speaking, so these modes and ways can be organized in different zones. In addition to epistemological commitments, the model also considers ontological and axiological commitments. The conceptual profile is an alternative in science teaching that allows considering previous conceptions, identifying different worldviews, and contributing to the enrichment of the student's scientific vocabulary. This model recognizes the cultural value of common sense, enabling the student to have contact with more grounded and complex forms of thought, capable of establishing more relationships and answering more questions. In this context, several studies have been conducted for several scientific concepts in order to propose their respective conceptual profiles, since the recognition of a given profile allows the student to understand the value of each vision according to its context and its philosophical basis, as well as to realize that using scientific terms can be useful to answer increasingly complex questions. Thus, this dissertation aims to propose a conceptual profile for the concept of covalent bond, which contemplates epistemological and ontological commitments. For this, a narrative review of the historical development of the concept was made, a systematic review on the misconceptions of chemical bond reported in the literature and the application of a questionnaire to a higher education class in chemistry. The data sources were chosen in order to analyze the concept from different genetic domains, being them, the sociocultural, the ontogenetic and the microgenetic. The data from the narrative review were divided into epistemological themes and served as a basis for categorizing the conceptions found from the systematic review and the questionnaire. These results were compiled in the form of a semantic matrix, presenting nineteen meanings, and transformed into four zones of a conceptual profile: indiscriminate connectivity, stabilizing attractiveness, localized remnant, and systematic relocation. The proposal contributes to discuss the approaches of the content, specifically, in the teaching of chemistry, to consider its polysemy and evolution in the student's learning, also allows the future planning of teaching units and textual analyses.

Keywords: Narrative Review, Systematic Review, Questionnaire, Misconceptions, Semantic Matrix.

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Zonas do perfil conceitual de substância.	32
Quadro 2 - Zonas do perfil conceitual de vida.	33
Quadro 3 - Zonas do perfil conceitual de morte.	34
Quadro 4 - Os compromissos sobre alimentação saudável.	35
Quadro 5 - Testes de busca feitos na plataforma <i>Web Of Science</i>	40
Quadro 6 - Procedimentos metodológicos e as questões de pesquisa.	43
Quadro 7 - Expressões de energia na TOM e na TLV.	66
Quadro 8 - Identificação dos modelos e teorias.	69
Quadro 9 - Identificação dos modelos e teorias (continuação).	70
Quadro 10 - Concepções do tema epistemológico animista.	76
Quadro 11 - Concepções do tema epistemológico realismo.	77
Quadro 12 - Concepções do tema epistemológico empirismo.	80
Quadro 13 - Concepções do tema epistemológico essencialismo.	81
Quadro 14 - Concepções do tema epistemológico racionalismo clássico.	82
Quadro 15 - Concepções do tema epistemológico racionalismo moderno.	84
Quadro 16 - Concepções do tema epistemológico racionalismo contemporâneo.	85
Quadro 17 - Respostas dos alunos participantes ao questionário.	87
Quadro 18 - Matriz semântica de significação do conceito de ligação covalente.	97
Quadro 19 - Caracterização da primeira zona.	102
Quadro 20 - Caracterização da segunda zona.	103
Quadro 21 - Caracterização da terceira zona.	104
Quadro 22 - Caracterização da quarta zona.	105
Quadro 23 - Concepções excluídas da análise dos dados	123

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
1.1 A pesquisa no Ensino de Ciências.....	11
1.2 Concepções alternativas e o modelo da mudança conceitual	12
1.3 A contribuição nacional às pesquisas em Ensino de Ciências.....	18
1.4 A Evolução do perfil conceitual	20
1.5 A escolha do conceito central	22
2 REFERENCIAL TEÓRICO	27
2.1 Conceito	27
2.2 Os compromissos epistemológicos e ontológicos.....	27
2.3 Programa de pesquisas em perfis conceituais.....	30
3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS.....	37
3.1 Revisão narrativa da história do conceito de ligação covalente	37
3.2 Revisão sistemática da conceitualização de ligação covalente	38
3.3 Questionário.....	41
3.4 Análise dos dados e a matriz semântica.....	42
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	44
4.1 O compromisso epistemológico de ligação covalente.....	44
4.1.1 Uma história sobre os antecessores da ligação covalente	44
4.1.2 Gênese do conceito de ligação covalente.....	51
4.2 A ligação química no domínio ontogenético.....	75
4.2.1 Revisão Sistemática sobre concepções alternativas	75
4.2.2 Questionário.....	86
4.2.3 A ligação entre os domínios da ontogênese e microgênese.....	95
4.4 Matriz semântica	96
4.5 Proposta de perfil conceitual de ligação covalente	102
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	106

REFERÊNCIAS.....	108
APÊNDICES.....	116

1 INTRODUÇÃO

1.1 A pesquisa no Ensino de Ciências

A partir das décadas de 1960 e 1970, as pesquisas em Ensino de Ciências sofreram grande influência do processo de desenvolvimento científico, desvinculando-se da concepção de ciência como um produto, da forma que vinha sendo considerada no método tradicional (VOSNIADOU, 2012). Grande parte desses trabalhos fundamentou-se na Epistemologia Genética de Jean Piaget (1929). A sua grande e seminal obra foi produto do estudo das ações de crianças e permitiu desenvolver uma teoria que buscava entender como o ser humano passa de um estado de menor conhecimento para um de maior conhecimento (VASCONCELOS, 1996). Porém, para o Ensino de Ciências, ainda havia a necessidade de mais trabalhos que considerassem, particularmente, sua epistemologia e seus conteúdos específicos. Nesse sentido, as teorias sobre a natureza da ciência, como os paradigmas de Thomas Kuhn, por exemplo, forneceram uma base a esses estudos sobre o processo de aquisição de conhecimento científico. A combinação das contribuições de Piaget e da filosofia da ciência forneceu a fundamentação teórica da maior parte dos trabalhos desenvolvidos nessa época (DUIT; TREAGUST, 2003).

Como apontado, na segunda metade do século XX, a filosofia da ciência recebeu diversas contribuições que seriam fundamentais para as discussões que estavam por vir, principalmente, para o Ensino de Ciências. Destacamos o trabalho de Thomas Kuhn, segundo o qual a ciência se desenvolveria através do trabalho do cientista, inserido em uma comunidade científica, em duas fases distintas (CHALMERS, 1993). A primeira fase, chamada de ciência normal, funciona com o cientista, conscientemente ou não, apropriando-se de um paradigma vigente em determinada área. Paradigma, nesse contexto, é um conjunto de compromissos definidos pela comunidade científica, em um certo momento histórico, que guia o desenvolvimento da pesquisa, indicando os possíveis problemas a serem resolvidos, as estratégias que podem ser seguidas e os critérios considerados válidos para a solução (KUHN, 1977)¹. Na segunda fase, chamada de ciência revolucionária, o

¹ Após várias críticas, Thomas Kuhn reconheceu que havia dado significados muito diferentes para a palavra paradigma em sua obra original ("A estrutura das Revoluções Científicas"). Com isso, no fim da década de 1970, publicou um ensaio intitulado "*Second thoughts on Paradigms*", no qual discute

paradigma vigente começa a acumular algumas falhas, que até então poderiam ser atribuídas a trabalhos muito específicos. Com um número considerável de fracassos, o paradigma dominante pode entrar em crise e ser substituído por um novo paradigma capaz de lidar com os problemas do seu antecessor, ocasionando uma revolução científica. Com o passar do tempo, a tendência da ciência revolucionária é se tornar a ciência normal, até que acumule alguns fracassos diante de anomalias, passe por uma nova etapa de revolução e assim por diante (CHALMERS, 1993).

Além de entender o caráter humano da ciência, Kuhn também identificou sua dependência de uma comunidade, e essas contribuições marcaram bastante seu trabalho dentro da Filosofia da Ciência. Para as pesquisas em Ensino de Ciências, no geral, a epistemologia da ciência, associada à perspectiva psicológica piagetiana, passou a ser fundamentação teórica, com base na filosofia, de como os conceitos poderiam ser ensinados em sala de aula.

1.2 Concepções alternativas e o modelo da mudança conceitual

É possível identificar, ainda na segunda metade do século XX, uma grande mudança no paradigma do Ensino de Ciências, na qual o aluno passa a ser considerado centro e protagonista do processo de ensino e aprendizagem. Com isso, grande parte das pesquisas buscou conhecer melhor sobre as concepções dos alunos, no que ficou conhecido como Movimento das Concepções Alternativas (DRIVER; EASLEY, 1978).

Vosniadou (2012) apresenta a diferença entre dois tipos de concepções: as concepções prévias e as concepções alternativas. A primeira é anterior ao momento em que o aluno tem contato com a ciência em um ambiente escolar e contempla as concepções de mundo a partir de sua própria história. Com ela, o aluno tende a explicar alguns fenômenos das maneiras mais diversas possíveis. Por outro lado, a segunda é posterior ao momento em que o aluno tem contato com as aulas de ciências, e pode surgir quando ele associa de forma incoerente as concepções prévias e as concepções consideradas científicas, logo, ela é alternativa à ciência. Uma concepção alternativa é, então, o resultado da associação equivocada das

qual significado pretendeu atribuir à palavra, destacando a importância da ação da comunidade científica.

ideias científicas com o conhecimento prévio, e ocorre durante o processo de ensino e aprendizagem (SANMARTÍ, 2009).

Os estudos sobre concepções alternativas mostram algumas características comuns que nos auxiliam a entender sua natureza. Sanmartí (2009) destaca, em seu livro, quatro características:

- a) Generalidade: grande parte das concepções alternativas se mostra independente de cultura, gênero e capacidade intelectual (não se encontram diferenças entre alunos com “bons níveis intelectuais” e alunos com problemas de aprendizagem). A diferença mais significativa aparece quando essas concepções se relacionam com alguma tradição, crença ou formas linguísticas muito específicas.
- b) Persistência: algumas concepções alternativas são mais duradouras que outras, principalmente quando parecem contradizer a experiência cotidiana. É uma das características mais marcantes e desafiadoras.
- c) Estruturação: os alunos recorrem sempre aos mesmos recursos para explicar diferentes fenômenos. Essa característica aparece, por exemplo, na substancialização de algumas propriedades na química, como a atribuição de cores, dilatação, contração aos átomos e moléculas e não como um resultado de um sistema complexo que envolve interações entre as partes menores.
- d) Dependência do contexto: os alunos tentam encaixar explicações com base no contexto em que o fenômeno acontece.

A literatura sobre concepções alternativas é bastante vasta e contempla várias áreas do conhecimento. Na química, podemos citar alguns exemplos de trabalhos, no contexto nacional, sobre os conceitos de equilíbrio (MACHADO; ARAGÃO, 1996), de ligação química (FERNANDEZ; RIBEIRO, 2006) e de reação química (MORTIMER; MIRANDA, 1995). Esses trabalhos geralmente destacam as semelhanças entre as concepções alternativas apresentadas pelos estudantes e as já superadas no decorrer do desenvolvimento científico, ao longo da história.

No contexto de uma sala de aula, de modo geral, as concepções alternativas podem ser consideradas como etapa essencial para ser estudada no processo de ensino e aprendizagem, pois as compreensões que acompanham os alunos tendem a permanecer e se acomodar, dificultando o desenvolvimento das atividades. Uma possível explicação para esse fenômeno é de que as concepções fazem parte de

algo maior chamado de ecologia conceitual (MORTIMER; EL-HANI, 2014). Logo, a dificuldade em se modificar uma concepção, dentro da mudança conceitual, reside no fato dela ter estabelecido conexões com diversas outras concepções (STRIKE; POSNER, 1992). Dessa forma, qualquer tentativa de questionar um conceito pode ser acompanhada de um conflito com vários outros conceitos, dificultando a aquisição de uma visão diferente.

A partir disso, é necessário entender quais os tipos de relações podem ser estabelecidos entre as concepções dos alunos e as concepções científicas, uma vez que eles não as abandonam tão facilmente. Mais precisamente, faz-se necessário compreender como as concepções dos alunos podem ser utilizadas no processo de ensino e aprendizagem.

Foi assim que, partindo da metodologia apresentada por Kuhn e fundamentados nas ideias de equilíbrio de Piaget, Posner *et al.* (1982) propuseram o modelo da mudança conceitual. Para os pesquisadores, é possível estabelecer uma analogia com o processo de desenvolvimento científico proposto por Kuhn, uma vez que os alunos utilizam seus conceitos para lidar com novos fenômenos, da mesma forma que ocorre na fase de ciência normal. Ao se confrontar com uma situação nova, da qual suas concepções não são suficientes para explicá-la, o aluno precisa passar por um movimento semelhante à revolução científica, adquirindo um conhecimento novo capaz de responder aos problemas que seu antecessor não poderia. Esses dois movimentos que aconteceriam no ensino de ciências foram chamados de assimilação e acomodação. Enquanto a assimilação é o uso de concepções prévias para explicar situações novas, na acomodação é necessário que o aluno passe por uma mudança em suas próprias concepções, realocando o conceito central. Como é defendido pelos autores, as concepções prévias dos alunos são partes essenciais do processo, sem as quais não teria sentido qualquer tipo de mudança conceitual: “antes de uma acomodação ocorrer é razoável supor que o aluno tenha acumulado alguns quebra-cabeças ou anomalias que não foram resolvidos” (POSNER *et al.*, 1982, p. 214, tradução livre)². Ainda segundo os autores, a acomodação deve satisfazer quatro condições para que

² “[...] before an accommodation will occur, it is reasonable to suppose that an individual must have collected a store of unsolved puzzles or anomalies”.

possa de fato ocorrer, as quais são: a insatisfação, a inteligibilidade, a plausibilidade e a fertilidade.

a) A insatisfação: assim como no trabalho científico, os alunos estão dispostos a fazer pequenas modificações em suas concepções para encaixar as explicações aos fenômenos. Porém, o aluno deve perceber que a concepção atual, em algum momento, perdeu sua capacidade explicativa. Principalmente em relação às situações que até então não haviam sido exploradas. A insatisfação com a concepção atual abre espaço para que novas ideias sejam trabalhadas.

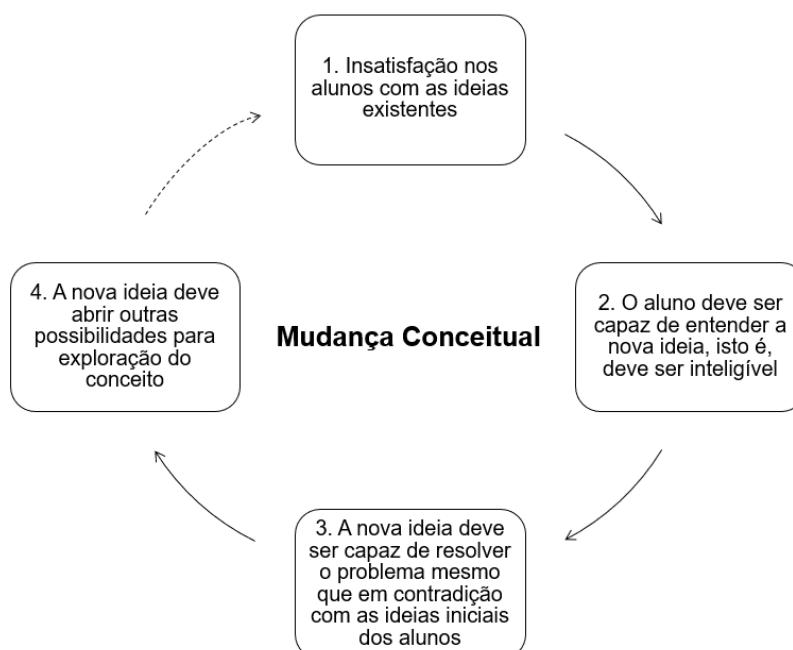
b) Inteligibilidade: para que uma nova concepção possa ser utilizada pelo aluno, é necessário que ele, primeiramente, a entenda. Essa condição deve ser preenchida, especialmente para que o aluno possa explorar as possibilidades inerentes a ela. Alguns autores ressaltam a importância de metáforas e analogias para que os alunos possam estabelecer relações com o que já conhecem (ORTONY, 1975).

c) Plausibilidade: a nova concepção deve ser capaz de resolver os problemas da sua predecessora, caso contrário não seria plausível escolhê-la naquele novo contexto. Além disso, a nova concepção deve ser consistente com outros conhecimentos.

d) Fertilidade: além da sua capacidade explicativa, a nova concepção precisa ir além de apenas resolver o problema inicial, precisa também abrir possibilidade de novas investigações, ser expandida e com novas formas de abordar o mundo.

Na Figura 1 podemos ver o esquema das etapas em sua ordem para que ocorra a mudança conceitual. A passagem da etapa 4 para a 1 pode ocorrer quando a ideia, até então considerada nova, é questionada a ponto de apresentar insatisfações e incapacidade de explicar algum fenômeno. Neste caso, pode-se iniciar novamente as etapas da mudança conceitual, para além da ideia de uma ciência estagnada.

Figura 1 - Condições para que ocorra a mudança conceitual.



Fonte: adaptado de Silva, Silva e Nuñez (2004, p. 232).

Assim que essas condições fossem satisfeitas no processo de ensino e aprendizagem, o aluno passaria a uma concepção diferente da inicial e que poderia acompanhá-lo até uma nova situação de assimilação e acomodação. O movimento da mudança conceitual, como ficou conhecido, foi por muito tempo sinônimo de aprendizagem em ensino de ciências nas abordagens construtivistas. Porém, por não possuir parâmetros muito bem definidos *a priori*, permitiu que muitas coisas, por vezes diferentes, fossem utilizadas com o mesmo nome. De forma geral, podemos entender a mudança conceitual como um movimento que nasceu da necessidade de contemplar a epistemologia da ciência no ensino e que vem sendo modificada no decorrer do tempo.

Strike e Posner (1992), em uma revisão sobre seu próprio modelo inicial da mudança conceitual, apresentam algumas alterações na primeira versão. A primeira delas é considerar que a ecologia conceitual vai além de fatores epistemológicos, incluindo, para isso, as relações individuais com as concepções e as afinidades entre elas. É também importante entender as concepções científicas e as alternativas como algo que não está isolado, mas sim mantém relações de significado entre si como algo que é dinâmico e está em constante alteração, isto é, ambas as concepções compartilham algum tipo de significado. O trabalho ainda ressalta que, na abordagem empirista, não era possível explicar apropriadamente por que as concepções eram tão resistentes à mudança, uma vez que era

necessário apenas substituir uma concepção por outra. Porém, quando entendemos a relação que as concepções mantêm entre si, é possível entender por que elas são tão resistentes e como elas podem mudar.

Duit e Treatgust (2003), em sua revisão sobre mudança conceitual, apresentaram como essa teoria foi se modificando no decorrer das últimas décadas, assim como as críticas associadas a ela. De acordo com o que foi sugerido em suas primeiras variantes, a mudança conceitual era entendida como uma ruptura do aluno com as concepções prévias, as quais ele abandonava após passar pelo processo de acomodação. Porém, os autores assumem uma visão diferente para a teoria em seu trabalho, na qual a mudança é algo menos abrupto e que ocorre através de uma reestruturação nos fundamentos, um caminho entre as concepções prévias e os conceitos científicos (DUIT, 1999). Para os autores:

Parece não haver estudos concluindo que uma concepção particular de um aluno poderia ser completamente extinta e substituída por uma visão científica. Na verdade, a maioria dos estudos mostra que as ideias antigas permanecem vivas em um determinado contexto (DUIT; TREAGUST, 2003, p. 673, tradução livre)³.

Esses diversos trabalhos também incluem compromissos epistemológicos, ontológicos e afetivos entre os alunos e os conceitos científicos, sendo a maioria focada na primeira posição. Chinn e Brewer (1998) apresentam que os alunos podem responder com mudanças periféricas aos conflitos entre suas concepções e aquelas apresentadas pelos professores, resolvendo as anomalias como situações particulares ou pequenas mudanças, sem alterar, de fato, sua concepção central. A partir dessa perspectiva, Duit e Treatgust (2003) advogam que são bastante visíveis as limitações em assumir uma única posição para entender a mudança conceitual, essas posições, segundo os autores, poderiam somar esforços para se relacionarem e não fragmentar como parece ter acontecido. Por fim, os autores ainda relatam que diversos trabalhos, seguindo o construtivismo radical⁴, exageraram no envolvimento do aluno e deixaram de lado os aspectos sociais da aprendizagem. Contudo, identificam grandes tendências em direção às teorias que dão igual atenção aos aspectos individuais e sociais. Por fim, como apresentado por Disessa (2014), a

³ “There appears to be no study which found that a particular student’s conception could be completely extinguished and then replaced by the Science view. Indeed, most studies show that the old ideas stay alive in particular contexts”.

⁴ Vertente defendida por von Glasersfeld (1989), na qual não há qualquer outra estrutura de conhecimento além daquelas construídas pelo indivíduo a partir da coordenação de suas experiências.

filosofia kuhniana foi utilizada como um suporte teórico no início da proposição da mudança conceitual, mas atualmente esse modelo vem sendo relacionado com outras abordagens da psicologia cognitiva, o que aponta para o alargamento de sua base teórica.

1.3 A contribuição nacional às pesquisas em Ensino de Ciências

Enquanto o modelo da mudança conceitual trouxe uma abordagem de como as concepções dos alunos poderiam mudar durante o processo de ensino e aprendizagem, em contexto nacional, surgiu a discussão sobre a dependência das várias abordagens em relação ao contexto em que o aluno está inserido. Para introduzir esses trabalhos, contextualizamos as contribuições filosóficas desse novo modelo.

A filosofia da ciência da segunda metade do século XX avaliava que era necessário reconhecer as diferentes formas de se ver e representar a realidade. Afinal, cada pessoa sofreu influência de lugares diferentes dentro de determinada cultura, além de que a ciência mantém o uso de várias teorias e modelos, concomitantemente. Destacamos, aqui, o trabalho de Bachelard (1984) que, desde 1940, havia apresentado o modelo de perfil epistemológico.

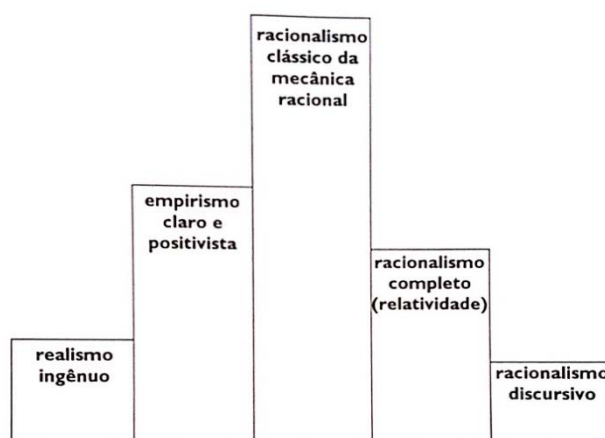
Segundo o filósofo, seria possível a cada indivíduo delinear seu próprio perfil epistemológico para cada conceito científico. O perfil epistemológico deveria se encaixar nas seguintes doutrinas filosóficas, segundo a releitura de Mortimer (2011, p. 72):

[...] o realismo ingênuo, que é basicamente o pensamento do senso comum; o empirismo, que ultrapassa a realidade imediata através do uso de instrumentos de medida, mas que ainda não dá conta das relações racionais; o racionalismo clássico, em que os conceitos passam a fazer parte de uma rede de relações racionais; o racionalismo moderno, em que as noções simples de ciência clássica se tornam complexas e partes de uma rede mais ampla de conceitos; e também um racionalismo contemporâneo, ainda em desenvolvimento, que englobaria os avanços mais recentes da ciência.

Na Figura 2 podemos ver o perfil epistemológico elaborado pelo próprio Bachelard sobre o conceito de massa. Podemos identificar na figura as diferentes zonas (realismo ingênuo, empirismo, racionalismo clássico, racionalismo completo e racionalismo discursivo) e uma atribuição de sentido (meramente qualitativa) a cada uma delas. Graficamente, quanto maior a área daquela zona, mais ela se faz presente no indivíduo durante seu discurso e compreensão de mundo. O

deslocamento entre as zonas que representam doutrinas filosóficas está associado ao que Bachelard (1996) chamou de obstáculo epistemológico. Segundo o autor, antes mesmo de considerar a complexidade dos fenômenos que buscamos entender, existe um obstáculo relacionado ao próprio conhecimento, guiados por “uma espécie de imperativo funcional, lentidões e conflitos” (BACHELARD, 1996, p. 17).

Figura 2 - O Perfil Epistemológico de Bachelard sobre o conceito de massa.



Fonte: Mortimer (2011, p. 75).

Ainda que possua um caráter individual, o levantamento de um perfil está relacionado a algo mais geral. Como apontado por Marton (1981), cada zona do perfil epistemológico está conectada a uma perspectiva filosófica, baseada, por sua vez, em compromissos epistemológicos distintos. É importante destacar que o perfil epistemológico se trata de uma forma de explicar a pluralidade de visões sobre um mesmo conceito dentro das ciências e, em um primeiro momento, não está relacionado diretamente com o complexo processo de ensino e aprendizagem. Por outro lado, a visão de ciências associada ao modelo pode ser utilizada como base para o tratamento do conteúdo no ensino de ciências.

Fundamentado principalmente nesse trabalho de Bachelard, o modelo de perfil conceitual foi proposto por Mortimer (1995) para reconhecer as diferentes formas de pensar e modos de falar dentro do processo de ensino e aprendizagem, como uma alternativa ao modelo de mudança conceitual. Esse modelo é construído para um determinado conceito e possui várias zonas, cada uma delas representando uma forma de pensar e se comunicar. Além de compromissos epistemológicos, como na filosofia de Bachelard, considera ainda os compromissos ontológicos e axiológicos (EL-HANI *et al.*, 2015).

Para o ensino e aprendizagem, esse modelo é utilizado como forma de relacionar dois processos importantes: (1) aprimorar o perfil conceitual do indivíduo; e (2) fazer com que o estudante tenha conhecimento das diversas zonas e do seu próprio perfil, reconhecendo cada contexto em que cada visão será melhor utilizada (EL-HANI; MORTIMER, 2007).

O perfil conceitual é uma alternativa para o ensino de ciências que permite considerar as concepções prévias, identificar diferentes visões de mundo, além de contribuir para o enriquecimento do vocabulário científico do aluno. Esse modelo, além de reconhecer o valor cultural do senso comum, possibilita ao aluno ter contato com formas mais fundamentadas e complexas de pensamento, capazes de estabelecer mais relações e responder a mais perguntas.

1.4 A Evolução do perfil conceitual

O conhecimento que o aluno traz da sua história se mostra útil em seu dia a dia e faz parte de uma cultura. Logo, é possível assumir uma perspectiva de ensino segundo a qual não há a necessidade de o aluno abandonar de imediato e abruptamente algumas ideias para aprender outras. Crespo e Pozo (2009) chamam essa relação entre diferentes abordagens de integração hierárquica.

A integração hierárquica se refere à importância de se diferenciar e relacionar diferentes explicações, reconhecendo em qual contexto cada uma é relevante, tendo consciência de que as condições dão lugares às formas distintas de se pensar e falar. Dessa forma, o processo de aprendizagem deveria fazer com que o aluno reconhecesse essas zonas, conseguisse identificar quais as diferenças entre elas e ainda soubesse qual o contexto em que cada uma é mais bem utilizada.

Essas zonas possuem uma generalidade que é aplicável aos mais diversos contextos e, embora as mais próximas ao senso comum possam ter forte influência de uma cultura local, as demais seguem um padrão que é muito mais dependente do contexto da ciência. Um caso particular dessa especificidade é que as diferentes zonas, na maioria dos casos, apresentam algumas semelhanças com a própria história do desenvolvimento científico.

Quanto ao processo de ensino e aprendizagem em si, uma alternativa, diretamente relacionada ao perfil conceitual, é a Evolução do Perfil Conceitual. O termo “evolução” é utilizado em contraponto às abordagens que envolvem a mudança conceitual, uma vez que as duas se diferem quanto aos limites entre uma

concepção e outra. Enquanto, na mudança conceitual, a aprendizagem ocorre através de uma reestruturação nos fundamentos e o aluno possui sua própria ecologia conceitual (DUIT, 1999), na evolução conceitual, o aluno, a partir do trabalho do professor, é capaz de identificar os diferentes significados de um conceito e utilizá-los em um contexto onde ele apresentará maior significado. Neste, segundo Duit e Treatgust (2003), a mudança conceitual seria dirigida pelo contexto e não aconteceria individualmente. Os autores comumente utilizam a ideia de ressonância para se referir a esse movimento do aluno (ou até mesmo do professor) de se alternar entre as diferentes zonas do perfil conceitual.

Para entender melhor a dinâmica envolvendo a evolução conceitual, Mattos (2014) sugere a ideia de Ordens de Aprendizagem para introduzir alguns marcadores do processo. Para o autor, a aprendizagem pode ser dividida em três partes distintas chamadas de primeira-ordem, segunda-ordem e terceira-ordem.

A primeira-ordem envolve a aprendizagem de um termo isolado de um contexto, como a aplicação de uma regra ou algoritmo, sem ter conhecimento do que está fundamentando a operação em si. Na segunda-ordem, o aluno é capaz de discriminar o uso da operação em um contexto específico, porém ainda não identifica que existem vários outros contextos e quais as operações devem seguir cada um deles. Na terceira-ordem, o aluno compreende a relação entre uma determinada zona do perfil conceitual com o contexto em que a atividade está inserida, interpretando e utilizando discursos significativos em situações apropriadas. Nesta última, o aluno tem autonomia para utilizar as zonas de forma adequada. É importante ressaltar que, para Mattos (2014), as ordens são independentes e podem acontecer simultaneamente ou em diferentes momentos, assim como não há uma ordem pré-estabelecida de qual deve aparecer primeiro.

Desse modo, para que seja utilizado no processo de ensino e aprendizagem, o perfil conceitual geralmente é pré-estabelecido e testado em diferentes contextos, para o reconhecimento de suas potencialidades e limitações. Desde a sua proposição, as pesquisas sobre perfil conceitual foram evoluindo no sentido de construir uma proposta de pesquisa que considere os pressupostos do modelo.

1.5 A escolha do conceito central

Para Mortimer *et al.* (2014), um programa⁵ de pesquisas sobre perfis conceituais não pretende gerar inúmeros trabalhos sobre todos os conceitos possíveis, assim como foram as pesquisas levadas a cabo para as denominadas concepções alternativas. De acordo com os autores, as pesquisas inseridas nesse programa visam construir perfis que contemplem três requisitos básicos: (1) ser um conceito preferencialmente central para uma dada ciência; (2) possuir uma quantidade suficiente de significados para que seja possível a criação de um perfil; e (3) estar presente na linguagem do cotidiano e na linguagem científica (EL-HANI *et al.*, 2015).

As pesquisas sobre perfis conceituais utilizam alguns procedimentos metodológicos em comum de forma a atingir os compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos na proposição das zonas que contemplam um perfil conceitual (MORTIMER; EL-HANI, 2014). Desde a proposição do perfil conceitual de átomo na década de 1990 (MORTIMER, 1995), diversos trabalhos vêm sendo realizados sobre alguns conceitos específicos. Citamos aqui algumas propostas de perfis para diversos conceitos científicos: Calor (AMARAL; MORTIMER, 2001); Reação Química (SOLSONA; IZQUIERDO; JONG, 2001); Vida (COUTINHO, 2005); Morte (NICOLLI, 2009) e Herança Biológica (REIS, 2018)

O perfil conceitual, dentro da temática de ensino e aprendizagem, busca um modelo para entender e utilizar a polissemia de conceitos centrais de uma ciência de forma a enriquecer o contato do aluno com a ciência produzida historicamente e socialmente. Dessa forma, compreendemos a extrema importância da área de Ensino de Ciências, especificamente em química, de analisar e organizar os possíveis significados que um indivíduo (e uma comunidade) pode apresentar sobre determinado conceito. Sendo assim, como identificamos no início desta pesquisa, destacamos a necessidade de discutir sobre os diversos significados associados ao conceito de ligação covalente. Diferente do que se apresenta em sala de aula, a conceitualização do termo envolve a linguagem do senso comum e a científica, de mais de uma área, sendo elas: a matemática, a química e a física.

⁵ A palavra “programa” utilizada neste trabalho, para se referir ao programa de pesquisas sobre perfis conceituais, está fundamentada nos trabalhos de Imre Lakatos sobre Programas de Pesquisas e nos textos de referência (CHALMERS, 1993).

Para esta pesquisa, a escolha do conceito central envolveu tanto o currículo do curso de química no nível superior quanto a ausência de um perfil estabelecido na literatura. Seguindo os três requisitos básicos apresentados na introdução, o conceito de ligação covalente: (1) é central, pois é fundamental a vários outros conceitos da química, como reação, formação de substâncias, polaridade, além de essencial à química orgânica (grande área da química); (2) possui vários significados associados ao conceito, como a ligação pelo compartilhamento de pares de elétrons como partículas, sobreposição de orbitais, densidade eletrônica, resultado matemático da sobreposição de orbitais atômicos, ligação de valência, orbitais moleculares *etc.*; (3) ligação covalente é um conceito que nasce dentro da comunidade científica, mas facilmente se torna linguagem utilizada pelo senso comum, através de movimentos como a antropomorfização da ideia de compartilhamento de elétrons.

Durante o ensino do conceito no ensino superior, é possível afirmar que há uma certa tradição cristalizada que segue uma abordagem linear e somativa para a apresentação de diferentes modelos sobre a ligação covalente, como apresentado em diversos livros didáticos (ATKINS; JONES, 2012a; MAHAN; MYERS, 1995). Além disso, identificamos que a ligação covalente possui suas próprias características e importância dentro da química, justificando a elaboração de um perfil conceitual que discuta as especificidades e que não seria possível em um aspecto mais genérico de ligação. Embora, como apresentamos à frente, não há como deixar de lado as concepções relacionadas à ligação química de modo mais geral.

Para a construção das zonas do perfil conceitual sobre ligação covalente, utilizamos, neste trabalho, estudos teóricos e empíricos provenientes de uma revisão narrativa, revisão sistemática e questionário aplicado em uma turma de ensino superior. Buscamos responder o seguinte problema de pesquisa: o que contempla e como se constitui cada zona do perfil conceitual para o conceito de ligação covalente?

O objetivo geral deste trabalho é propor e caracterizar as zonas do perfil conceitual para o conceito de ligação covalente. Como decorrência desse objetivo geral e da temática apresentada, delimitamos as seguintes questões de pesquisa:

1. Quais os avanços e rupturas na história do desenvolvimento científico do conceito de ligação covalente?

2. Como as concepções que envolvem o conceito de ligação química, identificadas na literatura, fundamentam o processo de criação do perfil conceitual e como essas concepções aparecem nos microprocessos em um contexto específico?
3. Quais compromissos epistemológicos e ontológicos podem ser identificados a partir da revisão narrativa da história, da revisão sistemática sobre concepções do conceito de ligação covalente e de um questionário aplicado a alunos do ensino superior?

Portanto, este trabalho pretende contribuir para o programa de pesquisas sobre perfil conceitual, organizando as teorias e modelos sobre ligação covalente a partir de um viés epistemológico e ontológico com vistas à proposição de zonas que contemplem um perfil conceitual. Nas próximas seções, apresentamos os referenciais teóricos adotados nesta pesquisa e os procedimentos metodológicos que foram utilizados para responder às questões e ao problema de pesquisa.

Na seção de introdução, resgatamos algumas discussões sobre o desenvolvimento da área de Ensino de Ciências, desde as suas possíveis origens e desdobramentos até os dias atuais. De todas as ramificações, abordamos especificamente os modelos que envolvem as concepções alternativas e tiveram grande influência da Filosofia da ciência. Discutimos ainda como o modelo da mudança conceitual foi se modificando com o passar dos anos e sua influência nas pesquisas nacionais, especificamente na proposição do perfil conceitual na década de 1990. Finalizamos a seção com a apresentação da escolha do conceito científico que faz parte dessa pesquisa, destacando os motivos que nos levaram a estudar mais profundamente esse tema.

Na seção sobre o referencial teórico, apresentamos mais profundamente sobre o programa de pesquisas de perfil conceitual desde a sua proposição, fundamentada na filosofia de Gaston Bachelard, até os avanços mais atuais. Esse programa de pesquisa passou a incorporar outros grandes estudos e apresentou diversas mudanças até se tornar o que escolhemos como o principal referencial dessa pesquisa. Uma das principais mudanças foi a incorporação de outros compromissos além do epistemológico, como o ontológico e axiológico. Destacamos alguns perfis conceituais, tentando abranger diversas áreas do conhecimento e mostrando que, em cada especificidade, o perfil conceitual pode se adaptar de acordo com as necessidades.

Na seção sobre os procedimentos metodológicos, apresentamos os meios para desenvolver esse estudo que estivesse de acordo com o programa de pesquisas sobre perfil conceitual. Utilizamos, para isso, três grandes fontes de dados: uma revisão narrativa sobre o desenvolvimento do conceito de ligação covalente na comunidade científica, uma revisão sistemática sobre as concepções alternativas na literatura especializada e um questionário aplicado para uma turma de graduação em química. Essas fontes de dados devem contemplar o conceito central dessa pesquisa a partir de três domínios genéticos, sendo eles, o sociocultural, o ontogenético e o microgenético. Para finalizar, apresentamos o modelo da matriz semântica que deve reunir todos os dados obtidos e apresentar sua síntese, encaminhando para a proposição das zonas do perfil conceitual.

Na seção sobre os resultados e discussão, apresentamos os dados das revisões e do questionário. Primeiramente, a revisão narrativa com uma proposta de história para o desenvolvimento do conceito de ligação covalente, desde as ideias de afinidade de uma matéria contínua até as teorias mais recentes como as que envolvem orbital molecular e funcional da densidade eletrônica. Nessa primeira etapa, propomos algumas divisões para os modelos e teorias que, posteriormente, chamamos de temas epistemológicos e que viria a ser um primeiro movimento de categorização. Feito isso, na apresentação dos dados de revisão sistemática, organizamos as concepções de acordo com as visões obtidas através dos temas epistemológicos. Essa segunda categorização permitiu que identificássemos categorias ontológicas, a partir da relação do sujeito com os conceitos desenvolvidos. Na última etapa da coleta dos dados, temos o resultado dos questionários, no qual foi identificado e comparado com as categorias encontradas até então. Para finalizar, organizamos todos esses dados na forma de uma matriz semântica de significação para o conceito de ligação covalente, na qual sintetizamos as informações encontradas a partir das três fontes de dados e que foi utilizada na elaboração das zonas do perfil conceitual.

Na última seção, concluímos o trabalho apresentando as principais contribuições desta pesquisa. Para isso, discutimos quais as inferências que podem ser feitas sobre a forma de pensar o ensino, especificamente, desse conceito de ligação covalente. Assim como as relações, em âmbitos mais gerais, com a grande área de Ensino de Ciências, buscando as potencialidades que os resultados aqui

apresentados podem oferecer. Para finalizar, organizamos algumas perspectivas futuras decorrentes desta dissertação.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Conceito

Um perfil conceitual busca organizar os vários significados de um mesmo conceito, para isso é necessário explicitar nosso entendimento sobre o que vem a ser um conceito. Grande parte da literatura utiliza a palavra “conceito” como um modelo mental e refere-se aos estudantes como “detentores” desses conceitos. Porém, como defendido por Wells (2008), os conceitos são artefatos culturais que passaram por proposição, revisão e enriquecimento de toda uma geração de comunidades de cientistas. Por serem artefatos produzidos culturalmente, eles não pertencem aos indivíduos, mas estão disponíveis para o uso de todos, na forma de ferramentas do pensamento (MORTIMER; EL-HANI, 2014). O contato dos alunos com essas ferramentas deve acontecer durante o processo de ensino e aprendizagem, do qual faz parte a conceitualização. Esta é resultado emergente da interação entre o cognitivo e algum evento externo, sendo sempre orientado pela natureza social (WELLS, 2008).

Nesse processo, os alunos têm contato com uma linguagem que é específica de uma ciência, a qual possui suas origens em processos de desenvolvimento com uma base histórica e filosófica. Uma vez que esse processo, ao longo de sua história, atribuiu mais de um significado para um dado conceito, faz-se necessário organizá-los de forma que os alunos tenham contato com uma forma organizada da polissemia, tendo consciência de qual contexto um conceito faz parte e quais eventos ele é capaz de explicar. Essa abordagem possibilita a discussão sobre modelos de ensino e sobre uma visão de ciência que está em constante desenvolvimento. Uma vez que um conceito está disponível para o indivíduo e este estabelece uma relação condicionada socialmente, é possível que vários significados sejam elaborados durante o processo. Para que todos esses significados sejam conhecidos de forma aprofundada, o programa de pesquisa sobre perfis conceituais vem aprimorando suas atividades nas últimas décadas.

2.2 Os compromissos epistemológicos e ontológicos

Os compromissos epistemológicos na elaboração do perfil conceitual estão fundamentados, principalmente, nos trabalhos de Bachelard, que classificou o desenvolvimento histórico-científico de acordo com doutrinas filosóficas

(BACHELARD, 1984). Destacamos, neste trabalho, algumas abordagens filosóficas apresentadas por Mortimer (2011) e Silva (2011):

(i) Realismo: relacionado com as experiências do cotidiano, nas quais não há qualquer questionamento ou reflexão sobre o assunto. As ideias são intuitivas e negam a racionalidade na interpretação dos fenômenos, além de não representar uma base sólida para o processo de conceitualização. Representa, ainda, uma busca pelo estabelecimento de uma relação entre o que é acessível do senso comum com a concepção da comunidade científica.

(ii) Essencialismo: caracteriza o pensamento e a fala ao atribuir propriedades essenciais, como o nome sugere, às coisas. Tais propriedades fazem das coisas o que elas são, as definem. O compromisso surgiu a partir dos trabalhos de Lakoff (1987), que identificou uma representação de mundo a partir de uma visão metafísica da realidade (SILVA, 2011).

(iii) Empirismo: é possível identificar uma mudança da simples realidade imediata para a dependência de um experimento, instrumento, medida *etc.* Porém, ainda não há qualquer relação estabelecida com outros conceitos, os quais estão limitados a algum tipo de prática.

(iv) Racionalismo clássico: nessa doutrina filosófica, podemos identificar as primeiras tentativas (por isso chamada de *clássico*) de estabelecer relações entre conceitos. Diferente do realismo e empirismo, não é feito a partir de uma realidade imediata, nem por um único indivíduo, mas sim a partir de bases fundamentadas, discutidas, refletidas e que não se estabelecem para um único fenômeno. Logo, o conceito pode ser capaz de explicar fenômenos ainda desconhecidos para os quais ele não foi feito, *a priori*.

(v) Racionalismo moderno: as relações estabelecidas entre os conceitos podem ser cada vez mais complexas. Apesar de um entendimento a partir de um conceito, como no racionalismo clássico, e não de uma experiência primeira, esse depende de variações e circunstâncias, deixando de ser simplesmente uma definição e abrindo possibilidade para mais situações.

(vi) Racionalismo dialético/contemporâneo: representa o desenvolvimento científico em sua etapa mais recente, com seus avanços e retrocessos. Nesse, a ciência não se limita apenas à realidade conhecida e, para isso, pode superar os conceitos modernos ou clássicos.

Durante o desenvolvimento histórico, é possível identificar ainda obstáculos que dificultaram a transição entre tais abordagens filosóficas para a ciência (BACHELARD, 1984; MORTIMER, 2011; SILVA; AMARAL, 2013). Em seu trabalho, Bachelard (1996) chama atenção para os obstáculos epistemológicos. Destacamos alguns deles:

(i) Substancialista: indica um obstáculo na formação do pensamento científico que está associado à atribuição de qualidades à substância e pode ser caracterizado por “materializar entidades que não são corpos nem matéria” (SILVA, 2011, p. 43). Está diretamente relacionado a uma concepção realista de mundo (fala-se, inclusive, em obstáculo realista), pois não há uma distinção clara para com o abstrato. Bachelard ainda destaca que o obstáculo substancialista está presente nos discursos que utilizam “palavras eruditas” e, apesar de fornecer uma primeira boa impressão, é extremamente vago e não acrescenta verdadeiramente em nada à discussão.

(ii) Verbal: está relacionado ao estabelecimento de um diálogo a partir de analogias e comparações. Muitas vezes utilizamos palavras que carregam significado, mas que dentro da comunidade científica não está totalmente coerente. Bachelard destaca que não é necessário se desfazer totalmente dessas conexões através de palavras já conhecidas, porém isso não pode ser a etapa final. É necessário ter consciência das limitações associadas ao tipo de relação que queremos estabelecer entre os significados. O obstáculo verbal é difícil de ser superado, pois associa uma palavra abstrata a uma palavra concreta. Esta pode aparentar ser tão “autoexplicativa” que substitui qualquer tipo de exploração.

(iii) Animista: o obstáculo representa uma busca incessante para aproximar as ciências físicas e químicas à biologia, como um apelo para a importância da vida. Bachelard (1996) destaca que esse obstáculo está bastante presente nas pesquisas do século XVIII e XIX. Ele está associado a atribuição de características comuns dos seres vivos à matéria inanimada, como se a vida possuísse um valor indiscutível e que permitisse, inclusive, a explicação de alguns fenômenos.

Além dos compromissos epistemológicos, destacamos que as concepções podem variar de acordo com compromissos ontológicos. Para essa discussão, usamos a abordagem de Chi (1992), que propõe uma forma de identificar as diferenças ontológicas das concepções. A autora apresenta exemplos de

características possíveis de serem atribuídas a entidades, em três categorias diferentes (CHI, 1992, p. 131):

- (i) Matéria: “é vermelho”; “é leve”; “é pesado”; “tem volume”; “ocupa espaço”;
- (ii) Eventos: “é em uma hora”; “aconteceu ontem”; “recesso”; “tempestade”.
- (iii) Abstrações: “é verdade”; “é sobre X”.

Para identificar a realidade intrínseca das categorias ontológicas, a autora propõe duas estratégias: (i) atribuir um grupo específico de restrições que governam o comportamento e as propriedades em cada categoria; e (ii) nenhuma operação física pode transformar uma entidade de uma categoria ontológica para a outra.

Na primeira estratégia, a categoria *matéria* inclui entidades que possuem certos atributos em comum, como possuir cor, massa, volume. Enquanto *eventos* e *abstrações* possuem outros tipos de atributos. Estes, segundo Sommers⁶ (1971 *apud* CHI, 1992), são uma propriedade que a entidade potencialmente pode ter, como ser vermelho ou azul, embora não seja especificamente vermelho ou azul, por exemplo. Na segunda estratégia, Chi (1992) exemplifica que a entidade “homem” (matéria) pode participar de uma entidade “corrida” (evento), movimentando-se (uma operação física), mas não pode ser modificado por ela: o “homem” preserva sua identidade ontológica.

Apresentados os compromissos ontológicos e epistemológicos que fazem parte deste trabalho, a seguir discutimos mais profundamente sobre as pesquisas envolvendo o perfil conceitual, bem como alguns exemplos em destaque.

2.3 Programa de pesquisas em perfis conceituais

As pesquisas envolvendo perfil conceitual podem ser divididas em duas frentes diferentes. Uma diz respeito à proposição das zonas de um perfil conceitual em si, enquanto a outra procura entender como as formas de pensamentos e comunicação dentro da sala de aula se relacionam e evoluem de acordo com as zonas do perfil conceitual. Embora seja comum a utilização de dados de questionários e entrevistas na proposição das zonas de um perfil conceitual, estes não têm o objetivo primário de avaliar a evolução do aprendizado de um conceito.

⁶ SOMMERS, F. Structural ontology. *Philosophia*, v. 1, n. 1, p. 21-42, 1971.

Seguindo na direção da proposição das zonas que contemplam um perfil conceitual, Mortimer e El-Hani (2014) apresentam duas estratégias que são comumente utilizadas nas investigações da literatura da área. A primeira envolve a análise histórica, filosófica e de concepções alternativas relacionadas ao conceito. A segunda se refere à utilização de dados de questionários e entrevistas com alunos tanto da educação básica como do ensino superior. Ao longo do desenvolvimento da pesquisa, as duas estratégias devem convergir, sendo que a diferença é de onde elas estão partindo. Essas estratégias estão relacionadas com a máxima vygotskyana de que, para conhecer inteiramente a gênese de um conceito, é necessário estudá-lo por diferentes domínios genéticos, sendo eles o sociocultural, o ontogenético e o filogenético (EL-HANI *et al.*, 2015). Em sua análise sobre os domínios genéticos, Wertsch (1985) discute sobre a inclusão de um quarto domínio, o microgenético. Nesta pesquisa, utilizamos, pelo menos, três dos quatro⁷ domínios genéticos, sendo eles o sociocultural, o ontogenético e o microgenético (WERTSCH, 1985).

O domínio sociocultural envolve a análise histórica do desenvolvimento do conceito e como ele evoluiu. O domínio ontogenético apresenta como o conceito é aprendido e como ele evolui na história do sujeito. O microgenético analisa os microprocessos que ocorrem em situações específicas, em períodos curtos de tempo em sala de aula, entrevistas e questionários (MORTIMER; EL-HANI, 2014). Para evitar a distância entre os dados obtidos em sala de aula e os encontrados na história e filosofia da ciência, eles devem ser trabalhados de forma dialógica. Além disso, as visões relacionadas a uma zona mais complexa e contemporânea podem não aparecer apenas com questionários e entrevistas, uma vez que os alunos, na maioria dos casos, ainda não tiveram contato com essas abordagens até aquele momento.

Desde que foi proposto, conforme já apresentado, muitos conceitos contemplaram a elaboração de um perfil conceitual seguindo os procedimentos adotados pelo programa. Como defendido por Mortimer e El-Hani (2014), cada pesquisa permite moldar as estratégias de acordo com a sua realidade e, ainda assim, manter-se coerente com o perfil conceitual. Para contextualizar esse modelo

⁷ O domínio “filogenético” de Vygotsky envolve a relação do conceito com a adaptação evolutiva do sujeito. Para Mortimer e El-Hani (2014), no programa de pesquisas sobre perfis conceituais, os outros três domínios genéticos são suficientes.

que faz parte de nossa pesquisa, exemplificamos alguns perfis conceituais e suas particularidades.

Silva e Amaral (2013) propuseram as zonas para um perfil conceitual de substância com base em textos de história da química, artigos na literatura em Ensino de Ciências, questionários e entrevistas semiestruturadas. Após a análise dos resultados, os pesquisadores definiram cinco zonas do perfil para o conceito de substância: a zona essencialista, a zona generalista, a zona substancialista, a zona racionalista e a zona relacional. No Quadro 1, podemos ver um trecho do que caracteriza cada zona dentro do perfil.

Quadro 1 - Zonas do perfil conceitual de substância.

Essencialista	“[...] as substâncias são a essência e o motivo principal da existência ou funcionamento das coisas. [...] guarda a essência dos objetos que ela compõe. Essa essência é uma entidade primária, que se conserva, mesmo após todas as mudanças e transformações.”
Generalista	“As substâncias são vistas de forma ingênua e sob um ponto de vista unicamente macroscópico e concreto. Na Grécia Antiga, podemos encontrar a ideia dos quatro elementos, proposta por Empédocles e difundida por Aristóteles. O elemento aqui tratado é o elemento filosófico, que segundo Aristóteles, é aquilo que compõe todas as coisas e não pode ser decomposto.”
Substancialista	“É demonstrada certa consciência de que a matéria é composta por substâncias e estas formadas por unidades menores. Para a constituição desta zona, consideramos a discussão de Bachelard com relação ao substancialismo. [...] flogisto às vezes era considerado como um material; às vezes como matéria de fogo; ou substância terrosa.”
Racionalista	“Nessa zona encontramos concepções em que o indivíduo apresenta uma conceituação quimicamente aceita de substância pura. [...] é limitado do ponto de vista da identificação e caracterização das substâncias. Considerando as propriedades bem definidas, os estudantes atribuem um comportamento padrão às substâncias sem atentar para as variações que este pode ter quando condições do meio são modificadas.”
Relacional	“As concepções que fazem parte desta zona possuem uma natureza problematizadora com relação às outras [...]. A substância química não é considerada como algo estático, que não se modifica na sua constituição e propriedades com o meio ou na relação com outras substâncias”

Fonte: Adaptado de Silva e Amaral (2013).

A síntese do trabalho dos autores sobre substância permite mostrar como um mesmo conceito pode apresentar diversos significados baseados em doutrinas filosóficas e momentos históricos distintos. No estudo, por exemplo, os autores utilizam a discussão de Lakoff⁸ (1987 *apud* SILVA; AMARAL, 2013) sobre metafísica objetiva essencialista e o compromisso realista e substancialista de Bachelard

⁸ LAKOFF, G. **Women, Fire, and Dangerous Things**. Chicago: The University of Chicago Press, 1987.

(1984) para definir algumas das diferentes zonas do perfil. O trabalho utilizou a epistemologia da ciência (fundamentado em Bachelard) e os compromissos ontológicos (CHI, 1992) para classificar as zonas do perfil.

Do ponto de vista da epistemologia, as zonas apresentam como o conceito de substância foi se modificando ao decorrer da história (desde a Grécia Antiga até trabalhos recentes), mostrando as diferenças e as semelhanças na construção científica desse conhecimento. Por outro lado, a ontologia se refere às atribuições de significados ao conceito, aquilo que o antecede. Nessa etapa, foi utilizada a classificação de Chi (1992) que diferencia todas entidades em: matéria, eventos ou abstrações. Como exemplo dessa última parte, temos a diferença ontológica no perfil conceitual de substância nas zonas essencialista e generalista. Embora do ponto de vista epistemológico não haja diferença entre as zonas, uma vez que nenhuma possui uma definição objetiva do que é substância, elas diferem em categorias ontológicas. Enquanto a essencialista se refere à substância de forma abstrata, na zona generalista encontramos uma categoria de substância como matéria (SILVA; AMARAL, 2013).

Para o perfil conceitual de vida, Coutinho (2005) utilizou dados que incluíssem três domínios genéticos. Para o domínio sociocultural, analisou dados históricos e epistemológicos, assim como livros didáticos de biologia. No domínio ontogenético, utilizou a literatura sobre concepções alternativas dos alunos. No domínio microgenético, utilizou os resultados de entrevistas e questionários. O Quadro 2 apresenta a síntese do trabalho e a proposição das categorias que compõem as zonas do perfil conceitual para o conceito de vida.

Quadro 2 - Zonas do perfil conceitual de vida.

Categoria reduzida	Categoria expandida	Concepções
Externalismo	Agente	A vida é interpretada como algo que vem do externo, algo que é concebido. Envolve expressões como transformação e relaciona diretamente a um deus e aos sentimentos.
	Artificialismo	
	Finalismo	
Essencialismo	Essencialismo Macro	Atribui à vida os processos e propriedades que são inerentes ao ser. As características podem ser macroscópicas (nascimento, reprodução, movimento) ou microscópica (metabolismo, celularidade, DNA, RNA).
	Essencialismo Micro	
	Mecanismo	
Relacional	Relacional	Aqui, são consideradas as operações relacionais sobre a vida. A interação de um organismo com o meio, e entre outros organismos.

Fonte: adaptado de Coutinho (2005, p. 31).

Além da proposição das zonas relacionadas ao conceito de vida, o autor estabeleceu uma metodologia para apresentar um perfil conceitual das turmas de graduação e pós-graduação do curso de biologia. A partir dos questionários, o autor destacou quantas vezes cada zona do perfil era identificada nas respostas, chamando esse parâmetro de Extensão da Zona no Perfil (EZP), que mede o grau de intensidade da zona em relação ao indivíduo. O resultado foi a classificação das respostas nas categorias reduzidas, apresentadas no Quadro 2. A concentração de algumas zonas em categorias menores, mas que contemplam ideias parecidas e que mantêm o compromisso epistemológico, ontológico ou axiológico. Com isso, foi possível estabelecer o perfil conceitual de alguns indivíduos e até mesmo de turmas inteiras (de graduação e de pós-graduação), possibilitando, assim, a análise da evolução do perfil conceitual.

Outro trabalho que nos chamou atenção foi a proposta das zonas de um perfil conceitual para o conceito de morte (NICOLLI, 2009). A pesquisa foi feita analisando a literatura de biologia, medicina, sociologia, psicologia e filosofia. Além disso, a autora analisou os dados de um questionário adaptado do trabalho de construção do perfil conceitual de vida, aplicado a alunos de graduação em biologia, medicina, ciências sociais e educação. No Quadro 3, podemos ver as zonas que contemplam o perfil conceitual de morte.

Quadro 3 - Zonas do perfil conceitual de morte.

Naturalista	Conceito construído a partir das teorias organicistas de vida, entendendo a morte como um fenômeno natural de um organismo que, mais cedo ou mais tarde, vai afetar todos os seres humanos.
Religiosa	Concepção de morte a partir das religiões, principalmente das que dizem respeito à imortalidade da alma. Nesses cultos, o diálogo sobre morte é sempre o que acontece depois dela.
Relacional	Nessa zona estão contempladas as formas de pensar que incluem a relação do ser humano com a morte. Considera-se as angústias, medos e dificuldades em aceitar a própria morte como forma de negá-la. Por outro lado, também são consideradas as visões históricas e culturais. Nesse contexto, para além do mundo físico, os mortos vivem entre os vivos através de seus trabalhos, contribuições e história.

Fonte: adaptado de Nicolli e Mortimer (2014, p. 306).

Nesse trabalho, podemos destacar uma alta variedade na literatura consultada, assim como o estabelecimento de uma zona referente à religião. Importante ressaltar que essa zona é fundamentada em trabalhos filosóficos, no que se refere à imortalidade da alma, e em diferentes doutrinas religiosas, como

budismo, catolicismo, espiritismo, hinduísmo, igreja ortodoxa, islamismo, judaísmo e protestantismo.

Por último, um trabalho para destacar as diferenças axiológicas na proposta de perfil conceitual, sublinhamos a pesquisa de Sodré (2018), que, mesmo não desenvolvendo um perfil conceitual, apresentou uma abordagem sobre alimentação saudável a partir da Física. Para analisar a aprendizagem em indivíduos, a autora utilizou a evolução conceitual e a análise dos compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos. No Quadro 4, podemos ver as classificações da autora, segundo os compromissos ontológicos, axiológicos e epistemológicos.

Quadro 4 - Os compromissos sobre alimentação saudável.

Ontológico	Atribuição de significados da alimentação relacionado à cultura do indivíduo. Nessa categoria, a alimentação se diferencia, por exemplo em coisas comestíveis ou não. A autora exemplifica utilizando o consumo de insetos, os quais podem ser comuns em uma cultura, mas não em outra. Mesmo dentro dessa categoria, a autora ressalta que em situações extremas, considerando o valor nutricional (logo, epistemológico) o consumo poderia ser aceitável.
Axiológico	Essa categoria foi utilizada para diferenciar a concepção de comida em relação ao valor que atribuímos a ela. Como oferecer um café para melhor recepcionar um convidado. Além disso a autora ressalta que a comida pode ser classificada em ocasiões, como comida de natal, comida de festa, comida de viagem etc.
Epistemológico	Aqui, encontramos características nutricionais dos alimentos, assim como questões de saúde pública e doenças relacionadas à alimentação.

Fonte: adaptado de Sodré (2018, p. 118).

Embora a elaboração das zonas do perfil conceitual possam considerar os compromissos axiológicos, Mortimer e El-Hani (2014) apresentam que essa é uma categoria implementada recentemente no programa de pesquisa sobre perfis conceituais. Sendo que este último pretende considerar a atribuição de valores e finalidades às diferentes zonas de um mesmo conceito. Segundo Mattos (2014), a consideração da axiologia está relacionada à avaliação e afetividade das relações do sujeito com a representação do mundo por ele e à aprendizagem emocional.

Assim que elaborado, o perfil conceitual permite que o aluno reconheça o valor de cada visão segundo seu contexto e sua base filosófica, além de perceber que, embora no cotidiano nem sempre seja viável, utilizar termos científicos pode ser útil para responder perguntas cada vez mais complexas. Utilizando esses exemplos de abordagens que utilizam o perfil conceitual, podemos perceber como o modelo pode se moldar a determinados conceitos ou, até mesmo, a temáticas, como é o caso da alimentação saudável, além de incluir diversas áreas de conhecimento e

suas semelhanças no estabelecimento de zonas ou na utilização de categorias. O que une os trabalhos como sendo parte de um programa de pesquisa de perfis conceituais é a organização de um mesmo conceito em várias zonas, a metodologia utilizada e a concepção de polissemia dos conceitos, cada uma oferecendo uma forma única de ver e interagir com o mundo, atendendo a compromissos epistemológicos, ontológicos e axiológicos.

Sendo assim, identificamos a necessidade de explorar e organizar os diferentes modos de pensar e formas de falar sobre o conceito, apresentando a síntese do trabalho na forma de um perfil conceitual de ligação covalente.

3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

Neste trabalho propomos realizar uma pesquisa qualitativa, com a finalidade de acrescentar ao programa de pesquisa sobre perfil conceitual, elaborando um sobre a polissemia relacionada à ligação covalente. Para tanto, seguimos uma sequência articulada de etapas que consistiram na realização de: (i) uma revisão narrativa da história e filosofia da ciência sobre ligação química, em geral, e ligação covalente, em específico; (ii) aplicação de questionário para alunos do ensino superior, produzido a partir da revisão narrativa; (iii) uma revisão sistemática das concepções alternativas sobre ligação química; e (iv) produção da matriz semântica para o conceito de ligação covalente.

3.1 Revisão narrativa da história do conceito de ligação covalente

A revisão narrativa, ou tradicional, é feita de forma mais abrangente possível e não possui um protocolo rígido de busca (CORDEIRO *et al.*, 2007). Pode ser conduzida quando a pesquisa tem interesse em conhecer de forma ampla um determinado assunto e não possui uma questão específica a ser respondida. O objetivo de conduzir uma revisão narrativa para a história e filosofia da ciência sobre ligações químicas foi possibilitar uma pesquisa mais aberta e que permitisse acompanhar e traçar a evolução do conceito na comunidade científica. Além de permitir utilizar fontes como livros de história e didáticos, não há interesse em levantamento estatístico nem de demonstrar a quantidade de publicações com essa temática.

Neste trabalho, utilizamos principalmente de fontes secundárias para traçar o desenvolvimento do conceito de ligação covalente a partir do viés histórico e filosófico, recorrendo, algumas vezes, aos originais. As fontes secundárias contemplam os trabalhos que já analisaram os textos originais e buscaram estabelecer uma conexão com o contexto em que foram escritos. Os principais títulos utilizados nessa busca foram: “Evolution of covalent bond” - (CLAPP, 1957); “Theory of valency in progress” (KUZNETSOV, 1980); “Valência e a ligação química” (MAHAN; MYERS, 1995); “A chemist’s guide to valence bond theory” (SHAIK; HIBERTY, 2008). Esses livros, por sua vez, levaram-nos a artigos que analisavam de forma mais específica diversos aspectos dentro da temática. Dessa forma, reunimos neste trabalho um recorte da história no tempo e espaço que defendemos

fazer parte de grande contribuição do que entendemos sobre o conceito de ligação covalente.

3.2 Revisão sistemática da conceitualização de ligação covalente

A revisão sistemática é um método específico de levantamento de dados que inclui etapas bem definidas e busca minimizar a influência do pesquisador nos trabalhos encontrados, uma vez que geralmente são apresentados apenas aqueles estudos que estão de acordo com a pesquisa em si. Além disso, por possuir parâmetros definidos *a priori* e uma questão a ser respondida, a reprodutibilidade tem que ser garantida e utilizada como forma de validação do método empregado. Costa e Zoltowski (2014) apresentam as seguintes etapas para realização de uma revisão sistemática:

- a) Delimitação da questão a ser pesquisada: é necessário ter clareza quanto aos conceitos que se está buscando. Uma mesma palavra pode estar associada a diferentes contextos e isso pode gerar um número muito grande de trabalhos.
- b) Escolha das fontes de dados: as bases de dados devem levar em consideração os tipos, as qualidades e os números de trabalhos disponíveis.
- c) Eleição das palavras-chave para a busca: as palavras-chave sintetizam os conceitos que serão levantados na revisão sistemática. É necessário ficar atento aos termos mais utilizados pelos pesquisadores e para o idioma.
- d) Busca e armazenamento dos resultados: a quantidade de trabalhos encontrados pode ser bastante extensa, então é preciso ficar atento para a organização dos trabalhos selecionados durante a busca.
- e) Seleção de artigos pelo resumo, de acordo com critérios de inclusão e exclusão: após as primeiras etapas e de selecionar os artigos, o autor da revisão deve se aprofundar nos trabalhos através dos resumos e buscar entender se os termos utilizados estão de acordo com o que foi proposto.
- f) Extração dos dados dos artigos selecionados: nessa etapa, é necessário ter contato com o texto completo do trabalho. Para evitar vieses, essa etapa é mais bem realizada por duas pessoas, as quais analisarão os termos dentro do trabalho completo e chegarão em um consenso sobre a utilização daquele termo, seguindo os critérios que foram definidos.

g) Avaliação dos artigos: após a etapa anterior, é necessário revisar os dados encontrados e analisar a pertinência do trabalho, sabendo agora de todo o contexto em que o termo buscado no início está inserido e se ainda faz sentido dentro daquela revisão.

h) Síntese e interpretação dos dados: na última etapa, os autores comparam os trabalhos encontrados a um quebra-cabeças e mostram que é necessário encaixar todos eles de forma coerente, apresentando como aquele conceito vem sendo utilizado pela área e qual a relevância que a revisão traz para a ciência.

Propomos essa abordagem como forma de compreender melhor os resultados encontrados, principalmente, sobre concepções alternativas de ligação química, e especificamente, a ligação covalente. Visto que a quantidade destes trabalhos é alta, faz-se necessário organizar os resultados apresentados na literatura.

A revisão sistemática deste trabalho foi feita considerando as plataformas que retornassem artigos científicos acerca do tema. Para responder à questão de pesquisa sobre concepções alternativas da literatura, utilizamos as plataformas: *Web Of Science*; *Education Resources Information Center* (ERIC); e *Scientific Electronic Library Online* (SciELO). Testamos alguns termos que consideramos pertinentes à resposta da questão específica para chegar a um número de trabalhos que fosse factível dentro do tempo estipulado. O teste, apresentado no Quadro 5, foi feito na plataforma *Web Of Science*, na opção “Todas bases de dados”, devido a sua maior abrangência na busca. As buscas foram feitas levando em consideração as seguintes ferramentas:

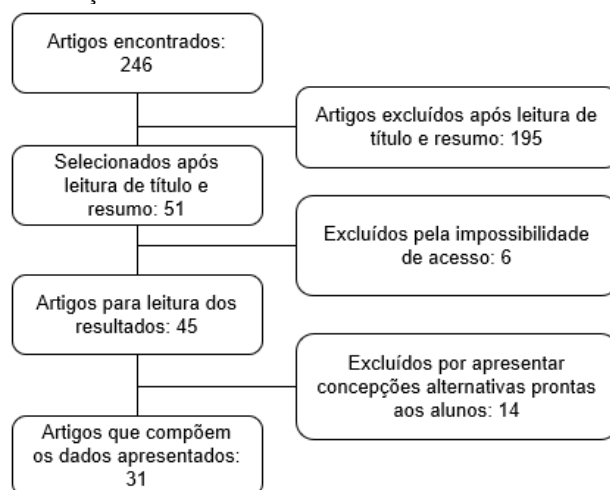
- (i) A opção utilizada “Tópico” recolhe as pesquisas com o termo pesquisado no título, resumo e nas palavras-chave;
- (ii) O operador booleano “AND” retorna apenas os trabalhos que contêm ambos termos pesquisados;
- (iii) O uso de aspas na busca restringe aos trabalhos que contenham os termos juntos, na ordem em que foram escritos.

Quadro 5 - Testes de busca feitos na plataforma *Web Of Science*.

Termo 1	Operador booleano	Termo 2	Quantidade de trabalhos encontrados
Misconception	AND	Bond	218
Misconception	AND	Covalent bond	46
Misconception	AND	"Covalent bond"	7
Misconception	AND	Chemical bond	112
Misconception	AND	"Chemical bond"	13

Fonte: elaboração própria.

A primeira opção (com duzentos e dezoito trabalhos encontrados), considerada mais abrangente, foi escolhida e utilizada nas outras plataformas (*ERIC* e *SciELO*) de forma que a quantidade total de trabalhos encontrados foi de duzentos e quarenta e seis (246). A opção pelo termo comum "*bond*" ocorreu, pois, mesmo o perfil sendo especificamente sobre ligação covalente, alguns significados podem ser compartilhados. Além do que o contato com concepções mais gerais poderia auxiliar nas especificidades da ligação covalente. Desse total de trabalhos encontrados, a partir da leitura do título e do resumo, selecionamos cinquenta e um (51), dos quais apenas quarenta e cinco (45) eram possíveis de ser acessados. Então, procuramos nos trabalhos completos as concepções alternativas que foram encontradas a partir do instrumento de pesquisa que seu autor utilizou. Nessa leitura mais completa, identificamos apenas trinta e um (31) trabalhos que contemplavam nossa resposta à questão de pesquisa. Os demais trabalhos, excluídos nessa última etapa, apresentavam concepções alternativas prontas, identificadas na literatura, e avaliavam a concordância do sujeito de pesquisa com elas. Como buscamos concepções que surgem diretamente dos alunos, no domínio da ontogênese, esses trabalhos foram excluídos, restando apenas os trinta e um. Na Figura 3, esquematizamos como ocorreu essa etapa de seleção de trabalhos.

Figura 3 - Seleção dos trabalhos encontrados na revisão sistemática

Fonte: elaboração própria.

Após a última etapa de seleção dos artigos, fizemos uma leitura dos resultados apresentados pelos autores e reunimos todas as concepções acerca do tema, que foram traduzidas (tradução própria) e reduzidas em apenas uma frase quando tratavam sobre a mesma coisa. Essas frases ainda foram classificadas de acordo com as concepções encontradas na revisão narrativa, para que pudéssemos organizá-las melhor e identificar relações ontológicas com o conceito.

3.3 Questionário

Para completar a coleta de dados do nosso trabalho, propomos a aplicação de um questionário formulado durante a primeira etapa de revisão. Esse procedimento metodológico permite recolher o testemunho dos participantes por escrito, permitindo que expressem suas opiniões a partir de um pensamento pessoal, com seu próprio sistema de referências (FREIRE, 2017). Os questionários podem ser apresentados com respostas padronizadas (geralmente associados com a escala Likert) ou permitir respostas abertas. Neste, as respostas ficam mais dependentes da competência do interrogado, mas também permite que os resultados sejam mais amplos e pessoais (LAVILLE; DIONNE, 1999), o que é de grande interesse nesta pesquisa. Por último, a análise das respostas de um questionário aberto fica por conta da construção de categorias que contemplem um conjunto de respostas. No programa de pesquisa de perfis conceituais, diversas propostas utilizam o questionário como fonte de dados. Mais precisamente, de 19 propostas de perfil conceitual analisadas em um trabalho desenvolvido

paralelamente, 13 utilizaram questionário como fonte de dados (BALTIERI; BEGO, 2019).

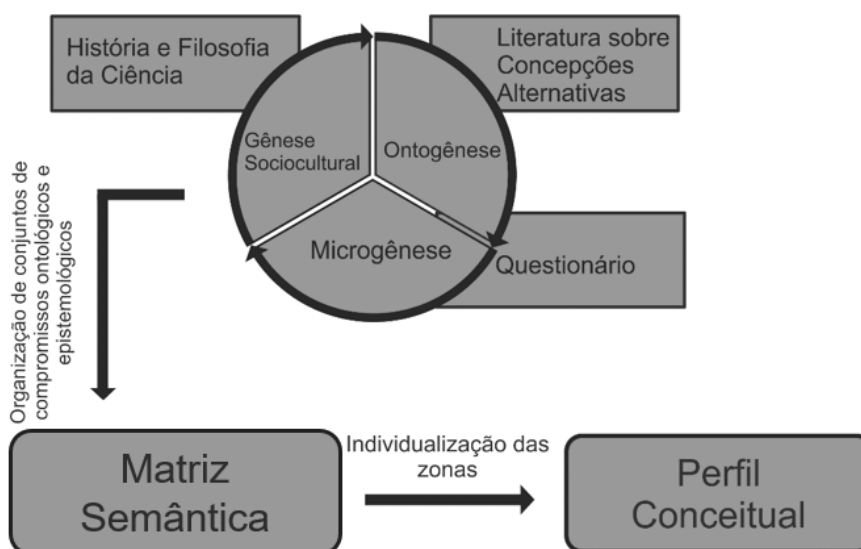
Neste trabalho, convidamos os alunos de uma disciplina de Química Inorgânica do terceiro ano do curso de Bacharelado em química a responderem um questionário (Apêndice 1) envolvendo conceitos sobre ligação química. No total, quatro alunos se disponibilizaram a responder o questionário e a participar da pesquisa, assinando um termo de consentimento livre e esclarecido (Apêndice 2). O questionário foi elaborado a partir da revisão narrativa da história do desenvolvimento do conceito e possui dez questões abertas, que contemplam cada um dos momentos identificados pela revisão narrativa (Quadros 8 e 9). Para responder, o aluno tinha acesso a uma questão por vez (cada questão em uma página) e era informado de que não poderia modificar as respostas após ter avançado para a próxima questão. Dessa forma, acreditamos diminuir a influência das questões nas respostas dos alunos, isso, pois, o nível de especificidade aumentava com o avanço das questões.

3.4 Análise dos dados e a matriz semântica

A combinação dos dados obtidos na pesquisa é uma das principais etapas da elaboração das zonas do perfil conceitual, assim podemos construir o conceito a partir de mais de um domínio genético. As revisões narrativa e sistemática e o questionário foram utilizados para contemplar três dos quatro domínios genéticos apresentados por Wertsch (1985), dos quais, sociocultural, ontogenético e microgenético.

Sepulveda, Mortimer e El-Hani (2013) propõem a criação de uma Matriz Epistemológica como forma de organizar os dados obtidos a partir de várias fontes. Reis (2018) sugere que o termo “epistemológica” seja substituído por “semântica”, pois a ferramenta não contempla apenas os compromissos epistemológicos. Na Figura 4, podemos ver a organização dos procedimentos metodológicos utilizados na proposição do perfil conceitual de ligação covalente com base na construção da matriz semântica.

Figura 4 - Representação esquemática da metodologia adotada na criação do perfil conceitual de ligação covalente



Fonte: adaptado de Sepulveda, Mortimer e El-Hani (2013, p. 444).

Por fim, apresentamos no Quadro 6 como cada um dos instrumentos de coleta de dados foram articulados com vistas a responder cada uma das questões de pesquisa: (1) Quais os avanços e rupturas na história do desenvolvimento científico do conceito de ligação covalente?; (2) Como as concepções que envolvem o conceito de ligação química, identificadas na literatura, fundamentam o processo de criação do perfil conceitual e como essas concepções aparecem nos microprocessos em um contexto específico?; (3) Quais compromissos epistemológicos e ontológicos podem ser identificados a partir da revisão narrativa da história, da revisão sistemática sobre concepções do conceito de ligação covalente e de um questionário aplicado a alunos do ensino superior?

Quadro 6 - Procedimentos metodológicos e as questões de pesquisa.

Questões de pesquisa	Revisão narrativa da história e filosofia da ciência	Revisão sistemática sobre concepções alternativas	Aplicação do questionário	Elaboração da matriz semântica
Questão 1	X			
Questão 2		X	X	
Questão 3				X

Fonte: elaboração própria.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 O compromisso epistemológico de ligação covalente

Quais os avanços e rupturas na história do desenvolvimento científico do conceito de ligação covalente?

4.1.1 Uma história sobre os antecessores da ligação covalente

A história do desenvolvimento científico do que entendemos como ligação covalente na contemporaneidade data de muito antes desse termo aparecer na comunidade científica e antes até dos estudos sobre a natureza do elétron. Nesta seção, apresentamos uma proposta de como o conceito de ligação covalente se desenvolveu ao longo da história da ciência, a partir de algumas concepções do século XVIII até os trabalhos mais recentes.

Desde as ideias mais antigas da alquimia até a química como conhecemos hoje em dia, as transformações da matéria sempre motivaram a busca por conhecimentos que permitissem entender e reproduzir alguns fenômenos (CHASSOT, 1995). Seu desenvolvimento pode ser marcado em vários momentos e, para falar sobre ligação covalente, iniciamos por volta do século XVIII, quando a disciplina química ainda era pouco reconhecida academicamente na Europa (JUSTI, 1998). Durante toda essa época, o conceito de afinidade foi bastante utilizado para se referir à relação que as substâncias apresentavam entre si. Wallau (2014) destaca que a palavra, em suas origens, era atribuída a um antropomorfismo⁹ ao associar as reações químicas a uma característica de relações sociais. O autor apresenta algumas obras clássicas de cientistas, como Robert Boyle (1627-1692), em *“Coleção de experiências e observações sobre a luta que é resultado da mistura dos corpos”*, e Herman Boerhaave (1668-1738), em *“Fazendo amor”*. Nestes, os autores compararam as reações químicas com uma luta entre substâncias e com uma relação de amor. Ainda no século XVIII, Étienne-François Geoffroy (1672-1731) organizou as substâncias conhecidas em uma tabela de acordo com suas

⁹ Atribuições de características tipicamente humanas a um conceito.

*Afinidades*¹⁰ (WALLAU, 2014). Na Figura 5, apresentamos a tabela criada por Geoffroy.

Figura 5 - Tabela de *Afinidade* de Geoffroy de 1718

↶	⊕	⊙	⊗	▽	⊖	⊕	SM	△	♀	♂	♀	♂	♂	♂	♂
⊖	2	♂	♂	⊕	⊕	⊕	⊕	⊖	⊙	♂	♂	♂	♂	♂	♂
⊕	♂	♀	⊖	⊙	⊙	⊙	⊕	♂	♂	♀	PC	♀	♂	♂	⊖
▽	♀	♂	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	♀	♂						
SM	♂	♀	▽		♂		♂	♂	♀						
	♂	♂	♂	♂				♂	♂						
		♀						♂	♂						
		♂						♂	♂						
	⊙							⊙							

↶ Esprits acides.	▽ Terre absorbante.	♀ Cuivre.	♂ Soufre mineral. [Principe.
⊕ Acide du sel marin.	SM Substances metalliques.	♂ Fer.	♂ Principe huileux ou Soufre
⊙ Acide nitreux.	♀ Mercure.	♂ Plomb.	♂ Esprit de vinaigre.
⊗ Acide vitriolique.	♂ Regule d'Antimoine.	♂ Etain.	♂ Eau.
⊖ Sel alcali fixe.	⊙ Or.	♂ Zinc.	⊖ Sel. [denta
⊕ Sel alcali volatil.	♂ Argent.	PC Pierre Calaminaire.	♂ Esprit de vin et Esprits an

Fonte: Wallau (2014, p. 1722).

A tabela na Figura 5 representa as relações de Afinidade entre as substâncias. Na primeira linha estão dispostas 16 substâncias e cada coluna representa as substâncias que foram analisadas e classificadas de acordo com a Afinidade. Por exemplo, na última coluna temos o símbolo para a água, espírito do vinho (*i.e.*, etanol) e sal, respectivamente. A ordem indica que a água possui mais Afinidade com o etanol do que com o sal, logo, se adicionarmos álcool a uma solução saturada, o sal precipitará (WALLAU, 2014). Embora Geoffroy tenha usado o termo *rapport* para evitar uma relação antropomórfica com as substâncias, seus contemporâneos continuaram com o significado da palavra atribuída a características humanas. O pouco prestígio da química, do ponto de vista acadêmico, como já dito, levou a uma série de trabalhos que passaram a incorporar conceitos de outras áreas reconhecidas, como a física e a matemática. Já nessa época, segundo Justi (1998), o desenvolvimento da mecânica Newtoniana pode ser atribuído ao início de uma concepção corpuscular para a matéria estudada na

¹⁰ Utilizamos o termo com letra maiúscula para se referir à Afinidade a partir do seu significado para a época, diferente de qualquer outro trabalho ou definição de dicionário.

química. Embora muito ainda viria a ser discutido pela comunidade, majoritariamente defensora de uma concepção contínua de matéria, já que essas partículas não eram observáveis empiricamente (DUNCAN, 1996). Nesse primeiro período histórico, identificamos uma concepção que relaciona características humanas às substâncias, fazendo com que a afinidade entre elas fosse um produto disso. A força que mantém as substâncias unidas estaria para elas assim como os sentimentos estão para os humanos. Atribuímos um tema epistemológico animista a esse tipo de pensamento (BACHELARD, 1984).

Alguns anos mais tarde, no início do século XIX, a comunidade científica passou por um período de bastante mudanças na concepção dominante de uma natureza contínua da matéria para uma concepção corpuscular. Embora várias décadas tenham sido necessárias para essa discussão, foi a partir desse período que a Teoria Atômica começou a fazer parte dos fundamentos dos trabalhos desenvolvidos nas ciências da natureza. Essa teoria, associada principalmente aos seminais trabalhos de Lavoisier e Dalton, tinha como base a concepção de que a matéria é composta por partículas microscópicas, esféricas, maciças e indivisíveis, chamadas de átomos e que se diferenciou da concepção aristotélica da matéria como algo contínuo, da forma até então prevalente (BRADY; SENESE, 2011). Para tanto, se a matéria era composta de pequenas partes, estas deveriam se ligar de alguma forma. Justi (1998) afirma que as primeiras concepções de afinidade foram se desenvolvendo até se dividirem em duas grandes concepções: uma estrutural e uma energética.

Uma maneira de explicar como ocorre a ligação entre as partículas, em uma concepção corpuscular da matéria, foi proposta pelo químico sueco Jöns Jacob Berzelius. No Dualismo de Berzelius, como é conhecida a teoria, a formação de um composto acontecia a partir da união de uma substância¹¹ eletronegativa (geralmente um ácido ou oxigênio) com uma eletropositiva (um metal ou uma base) (LEISCESTER; KLICKSTEIN, 1965). Essas propriedades pertenciam à substância¹² e passavam a ser propriedade do composto quando estas se ligavam. Nessa linha de pensamento, por exemplo, o óxido de enxofre é eletronegativo em relação aos

¹¹ Tradução livre de *substance*.

¹² Assim como em outros modelos e teorias, alguns termos como “eletronegativo”, “eletropositivo”, “substância”, “composto”, “valência” possuem um significado próprio dentro do contexto que estava sendo utilizado.

óxidos metálicos, pois o enxofre é mais eletronegativo que os possíveis metais que poderiam se ligar ao oxigênio. Assim como vários outros exemplos, o dualismo (eletropositivo/eletronegativo) pode ser estendido para alguns compostos conhecidos e era capaz de explicar a formação de vários deles. Entendemos que toda combinação química, nesse contexto, dependeria unicamente de duas naturezas elétricas, uma positiva e uma negativa¹³, em uma composição de partes unidas por uma reação eletroquímica (como era chamada na época). Em reações de substituição, um elemento eletronegativo só poderia substituir outro também eletronegativo, assim como um eletropositivo só substituiria um outro eletropositivo (CLAPP, 1957). Destacamos também que nessa época a fórmula dos compostos, associada com as concepções de ligação, eram calculadas com base nos pesos atômicos. Além disso, Berzelius contribuiu para a temática de forma a utilizar letras ao invés de desenhos para se referir aos elementos, forma que foi muito bem recebida pela comunidade científica.

Embora a comunidade científica não houvesse apresentado ainda qualquer conceito relacionado à covalência, podemos identificar alguns aspectos que semeiam a discussão, destacando, assim, uma primeira mudança em relação ao modelo anterior de ligação entre substâncias, deixando de ser associada com características humanas. Nessa época, o conceito de ligação estava presente na conectividade entre os átomos, como o produto da combinação entre duas propriedades (eletropositivo e eletronegativo), sem qualquer distinção quando se ligavam átomos diferentes, por exemplo. Atribuímos a esse período uma visão epistemológica realista, pois a ligação é algo secundário e não há qualquer reflexão sobre o próprio fenômeno de conectividade.

O dualismo eletroquímico se estendeu por várias décadas durante o século XIX, mas as limitações começaram a aparecer quando alguns experimentos apresentavam reações nas quais substâncias eletronegativas eram substituídas por outras eletropositivas. Um caso específico foi defendido por Jean-Baptiste Dumas ao estudar porque algumas velas exalavam odor ruim nas igrejas (CLAPP, 1957). O cientista chegou à conclusão de que a cera utilizada podia ter alguns de seus

¹³ Embora essa concepção de ligação química dualista se aproxime muito da ligação iônica, quanto à atração do positivo com negativo, é necessário lembrar que são fundamentalmente diferentes, até mesmo porque naquela época, partículas menores que o átomo não eram conhecidas e a existência de íons só apareceu mais tarde.

hidrogênios (eletropositivos) substituídos por cloros (eletronegativos), o que até então não era previsto. Dessa forma, Dumas passou a defender que todos elementos poderiam ser substituídos por outros sem mudar as propriedades do composto (*i.e.*, quando as substâncias se ligavam) como previa a Teoria Dualista. Isso deu origem a outras discussões e abriu espaço para que demais interpretações e teorias surgissem. Nesse momento da história, podemos identificar o desenvolvimento de duas teorias: a Teoria dos Radicais e a Teoria dos Tipos.

A Teoria dos Radicais pode ser entendida como uma categorização de diferentes combinações atômicas. Essa teoria surgiu nas pesquisas de química orgânica e logo foi levada para outras áreas, como a inorgânica. Seu principal defensor, Edward Frankland (NOGUEIRA; PORTO, 2018), tinha interesse em analisar as propriedades comuns a alguns compostos, que se mantinham ou não durante a formação de novas moléculas. A Teoria se iniciou durante a mesma época em que se destacava a ideia dualística de Berzelius, mas aos poucos foi incorporando novas atribuições que até o momento não eram exploradas. Assim como sua rival, a Teoria dos Tipos, também se ocupava em organizar os compostos em categorias, com a diferença que na Teoria dos Radicais, estes podiam existir de forma isolada. Os trabalhos tornaram possível explicar as reações de síntese e a ideia de uma conectividade para além de uma propriedade invariável do átomo. A ligação era entendida como uma conexão entre radicais que podiam variar em relação à sua força de combinação¹⁴. Esse parâmetro avaliava a possibilidade de uma reação ocorrer, pois, quando um radical (que está livre) possuía uma força de combinação mais intensa em relação ao que já estava ligado, ocorreria uma substituição de ligantes. A Teoria dos Radicais permitiu que se explicasse uma variedade maior de reações do que a Dualidade fazia e possibilitou a introdução dos estudos de compostos organometálicos e uma série de reações de oxidação e redução (CLAPP, 1957). No entanto, com as dificuldades que existiam em sintetizar radicais que fossem estáveis e a falta de parâmetros que explicassem a força de combinação, a teoria foi se enfraquecendo (NOGUEIRA; PORTO, 2018).

Em relação ao dualismo eletroquímico, pouco se avançou no entendimento da natureza da ligação em si. Porém, podemos identificar um passo importante no desenvolvimento do conceito de ligação: a propriedade “força de combinação”,

¹⁴ Do inglês, *combining power*.

atribuída aos radicais, refletia uma primeira forma de analisar a ligação. Isso, pois a força que existia entre as substâncias que se ligavam (nesse caso um grupo de átomos chamados de radicais) podia sofrer variação. No entanto, essa força ainda era uma propriedade do radical e não havia qualquer indício de uma natureza própria da ligação.

No final da década de 1830, Dumas sugeriu a categorização de ligantes que possuíam propriedades semelhantes. Estes foram organizados em tipos, por isso a teoria foi chamada de Teoria dos Tipos (CLAPP, 1957). A partir dessa organização, era possível prever algumas reações, assim como as propriedades do composto de acordo com o tipo que se ligava. A ligação, nesse caso, era a conexão entre os diferentes tipos de átomos agrupados e o termo “poder de combinação” descrevia quão forte poderia ser essa ligação e quais reações os tipos poderiam participar. Nessa teoria, os diferentes tipos não existiam de forma isolada, prontos para se ligarem, mas serviam ao propósito de classificação. Isso permitiu uma maior divulgação entre a comunidade científica, pois não havia a preocupação em se sintetizar os tipos, uma vez que não era prevista a existência deles de forma isolada. É possível que essas categorizações, que passaram a ser comuns nessa época, sejam o início do que conhecemos hoje por funções orgânicas. Nessa mesma época, atribuímos, principalmente, a Frankland a popularização do termo “ligação química”, em detrimento do termo mais genérico “valência”, da forma como era utilizado (CLAPP, 1957). O ato de atribuir um nome ao fenômeno contribuiu para que cada vez mais pesquisadores se preocupassem em o analisar criticamente, deixando de ser algo secundário.

A Teoria dos Tipos ganhou muitos defensores devido à sua capacidade em explicar alguns fenômenos envolvendo reações orgânicas, mas em relação à ligação química pouco se avançou quando comparado às teorias anteriores. A ausência de questionamentos sobre como e o porquê a ligação ocorria, presente em todas elas desde o Dualismo, continuou a refletir uma visão realista.

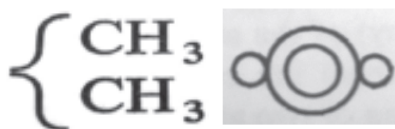
Conjuntamente com esses trabalhos, o termo “valência” se popularizou bastante durante todo o desenvolvimento acerca das teorias de ligação e teve vários significados associados a ele. O termo pode ser considerado como uma combinação das teorias dos radicais e dos tipos e dividida em três momentos (NOGUEIRA; PORTO, 2018): (i) uma propriedade numérica dos átomos; (ii) a interação entre os

átomos; (iii) sinônimo de ligação química. Quanto à etimologia, o termo pode ter surgido do latim “*valere*”, referindo-se à força que mantém os átomos unidos.

(i) Como propriedade numérica dos átomos, o termo foi se alterando: basicidade (monobásico, dibásico, tribásico), atomicidade (monoatômico, diatômico, triatômico), equivalência (univalente, bivalente) e quantivalência (mônada, díade, tríade). Na metade do século XIX já apareciam trabalhos na literatura advogando a padronização do uso dos termos.

(ii) Como interação entre átomos, seus defensores utilizavam a ideia de conexão e afinidade. Eram comuns os estudos com foco em substâncias já formadas e não em como cada átomo, individualmente, podia se comportar. A partir disso, a valência já não era uma propriedade invariável do átomo, mas algo que poderia se modificar em cada molécula. Eram comuns as representações utilizando chaves e parênteses, além de formas circulares que representavam os átomos e o contato entre eles representava uma ligação. Na Figura 6, podemos ver a representação do etano utilizando chaves e a molécula de H₂O utilizando esferas conectadas entre si.

Figura 6 - Representações associadas à ideia de valência



Fonte: Nogueira e Porto (2018, p. 119).

(iii) Como sinônimo de ligação química, as pesquisas passam a se preocupar mais com a ligação em si do que com sua relação com os átomos que a realizam. Há uma tentativa de diferenciação na terminologia quanto aos termos “*valency*”, como o poder de combinação (que aparece em outras teorias) do átomo, e “*valence*”, como a própria união entre os átomos (distanciando-se de algo intrinsecamente relacionado ao átomo). A representação era comumente feita por linhas que ligavam os átomos em círculos ou simplesmente os símbolos dos elementos.

Apenas em meados do século XIX foi que a comunidade científica começou a explorar mais especificamente a ligação química, no que viria a ser a ligação covalente. Antes, como apresentado, não havia uma preocupação explícita em estudar especificamente a natureza da ligação e porque ela ocorria. Podemos associar uma crescente dessa exploração com os trabalhos de Kekulé e Butlerov

(KUZNETSOV, 1980), sendo o primeiro fortemente associado aos trabalhos de Liebig, Dumas, Gerhardt, entre outros (CLAPP, 1957). Butlerov aparentemente foi o primeiro a utilizar o termo “estrutura química” e defender que as propriedades de um composto poderiam estar associadas ao arranjo dos átomos na molécula. Kekulé, e seu reconhecido trabalho sobre a natureza do carbono, apresentou o que ficou conhecido como “postulados de Kekulé”.

Em relação às demais teorias, a valência representou uma dedicação maior sobre a ligação química no que se referia à sua natureza e permitiu o próximo passo para o conceito de ligação covalente. A valência, mais próxima de ligação química, começou a romper com a concepção realista, da ligação como algo que simplesmente ocorria, e passou a apresentar características fortemente empiristas. O conceito estava diretamente relacionado às medidas experimentais de peso atômico e análise elementar, as quais refletiam um resultado matemático associado à medida. Um avanço nas pesquisas podia ser associado com a melhoria na instrumentalização, por exemplo, que derivava no número de valência associado ao átomo. Ao longo do século XIX, é possível reconhecer um avanço sobre o entendimento da comunidade científica em relação à natureza da ligação covalente. Ainda que, até o fim do século, ninguém utilizasse o termo covalente, nem mesmo concebesse a existência de uma partícula eletricamente carregada.

4.1.2 Gênese do conceito de ligação covalente

Segundo Araujo Neto (2007), em um mundo sem elétrons, a valência era sinônimo de ligação química, ou seja, mesmo antes de discutirem a existência de uma partícula subatômica, já sabiam que deveria existir algo que mantinha os átomos unidos. O autor ainda identificou que, nos anos que acompanharam a mudança do século XIX para o XX, juntamente com a concepção do elétron como partícula, houve uma mudança do conceito de valência: de um número associado a um elemento (macroscópico e empírico) para valência relacionada aos elétrons mais externos de um átomo (submicroscópico e teórico).

Um trabalho em destaque no começo do século XX foi desenvolvido por Gilbert Newton Lewis (1916), com uma ampla divulgação associada a Irving Langmuir. Nessa época, a ligação covalente começa a ganhar significado enquanto compartilhamento de elétrons em pares. A concepção de ligação covalente passa a ser muito mais restrita e ainda possibilita a diferenciação de uma natureza de

atração entre cargas, como foi considerada a ligação iônica. Essas ideias possibilitaram explicar a existência de várias moléculas, em específico as que envolviam elementos até o segundo período da tabela periódica. Embora a comunidade ainda não explicasse com êxito – e talvez nem mesmo existisse o interesse na época – o porquê de os átomos serem mais estáveis compartilhando pares de elétrons entre si, o modelo proposto por Lewis foi bastante aceito e compartilhado.

Filgueiras (2016) destaca três trabalhos de Lewis que contribuíram para o desenvolvimento do conceito de ligação covalente. No primeiro, intitulado “Valência e Tautomerismo” (LEWIS, 1913), Lewis retomou as ideias sobre valência como um número associado ao átomo, estabelecendo uma relação com a quantidade de ligações que esse realiza. A partir do segundo, “O átomo e a molécula” (LEWIS, 1916), destacamos um postulado de Lewis que, embora reconhecesse a influência da repulsão das cargas, seguindo a lei de Coulomb, optou por utilizar, *a priori*, apenas os fenômenos químicos¹⁵. O terceiro trabalho foi resultado de uma conferência e se intitulava “Valência e o Elétron” (LEWIS, 1923). Neste, fica ainda mais evidente a relação da sua Teoria com a definição de ligação covalente para a época, Filgueiras (2016, p. 1266) destaca:

Estejamos lidando com compostos orgânicos ou inorgânicos, a ligação química é sempre o par de elétrons. Por mais importante que seja o par de elétrons para a teoria total da valência, deve-se observar que tal par não é fundamentalmente diferente de outros pares que não formam ligações.

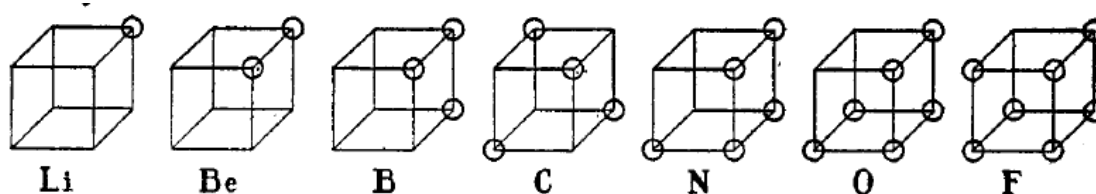
Neste trecho fica evidente a relação da Teoria de Lewis com a ideia de par eletrônico. Outra explicação bastante utilizada na época se baseava no octeto eletrônico, a qual atribuía um aumento na estabilidade do átomo ao número de elétrons na camada de valência. A constatação de que os gases nobres eram estáveis e, com exceção do hélio, possuíam oito elétrons na camada de valência, segundo Brown *et al.* (2016, p. 319), levou a uma generalização conhecida como regra do octeto: “átomos tendem a ganhar, perder ou compartilhar elétrons até que estejam circundados por oito elétrons de valência.”

Em seu trabalho, Lewis buscou explicar a ocorrência de eletrólitos fortes e fracos a partir da ideia de uma ligação que variava entre dois extremos: a covalente

¹⁵ “[...] we consider only known *chemical phenomena*, and their best interpretation in terms of atomic structure [...]” (grifo nosso) Lewis (1916, p. 780).

(o par compartilhado) e a iônica¹⁶ (SHAIK; HIBERTY, 2008). Para desenvolver suas ideias, Lewis (1916) utilizou um modelo cúbico, no qual os vértices podiam conter elétrons. Na Figura 7, podemos ver a representação dos átomos do segundo período da tabela periódica. Nos vértices, representados por esferas, estão os elétrons da camada de valência.

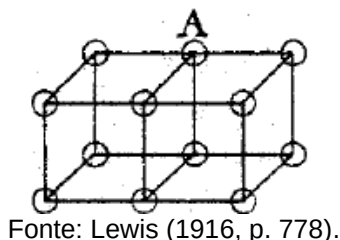
Figura 7 – Representação dos átomos como cubos.



Fonte: Lewis (1916, p. 767).

Ainda segundo Lewis, a ligação poderia ser analisada como o encontro de arestas (ligação simples) ou duas faces (ligação dupla) do cubo. Sempre apontando para a ligação como o compartilhamento de elétrons em pares. Na Figura 8, podemos ver um exemplo da representação de como ocorrem as ligações duplas. Em A, os átomos compartilham quatro elétrons entre si (dois pares).

Figura 8 - Representação da ligação dupla a partir do compartilhamento de pares de elétrons.



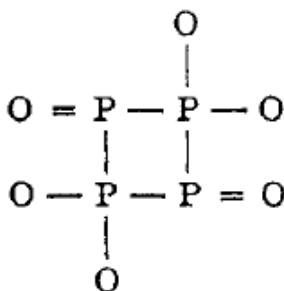
Fonte: Lewis (1916, p. 778).

Para Lewis (1916), a ligação tripla representa o máximo de elétrons que podem ser compartilhados entre átomos e não há uma representação simples na forma de cubos. Além das representações utilizando cubos, a que mais foi incorporada pela comunidade científica foram os pontos ao redor do átomo para representar os elétrons da camada de valência. Os dois pontos (:), escritos entre os símbolos dos átomos, representam a ligação a partir dos elétrons compartilhados. Alguns anos mais tarde, Langmuir (1919) articulou o modelo de Lewis para vários outros elementos na tabela periódica e contribuiu para a disseminação da ligação a partir do compartilhamento de pares de elétrons. O cientista introduziu o termo

¹⁶ O autor utiliza os termos polar (para ligações covalentes) e não-polar (para ligações iônicas) (LEWIS, 1913).

isótero para se referir a moléculas ou íons que se acreditava ter a mesma estrutura eletrônica devido às suas propriedades semelhantes (MULLIKEN, 1970). Na Figura 9, temos a representação de uma molécula na qual as linhas representam pares de elétrons compartilhados.

Figura 9 - Representação utilizada por Langmuir



Fonte: Langmuir (1919, p. 917).

É nesse momento histórico que o termo referente a esse tipo de ligação começa a ser “ligação covalente”. Quanto à representação, apesar do traço já ter sido utilizado pela comunidade científica décadas antes para indicar uma conectividade entre átomos, o símbolo adotado passa a representar dois elétrons compartilhados. Em relação às outras teorias, embora mantenha atributos empíricos, esse conceito não está diretamente relacionado à medida. Identificamos, nesse período, duas passagens características que marcaram a mudança na concepção de ligação química e, especificamente, a ligação covalente. Que passa de um empirismo, ao associar a ligação ao termo valência, para, primeiramente, um essencialismo ao atribuir uma característica essencial às ligações. Essa característica fica bastante marcada pelo trecho destacado anteriormente, no qual Lewis se refere às ligações como sendo o par de elétrons entre átomos, desse modo, qualquer ligação com um par de elétrons entre átomos é, necessariamente, uma ligação covalente. Por outro lado, reconhecemos que essa descrição de Lewis indica uma etapa intermediária no entendimento da própria ligação, além de permitir o desenvolvimento de vários outros trabalhos, como os apresentados na sequência.

Sendo assim, destacamos que, durante os anos que se seguiram, a contribuição de Lewis significou uma relação de ligação a um conceito que passou a se relacionar com outros conceitos em uma rede. A ligação covalente a partir do compartilhamento de pares eletrônicos, dentro de uma rede com outros conceitos, apresenta uma visão que chamamos de racionalismo clássico.

Os trabalhos pioneiros de Lewis permitiram que a ligação covalente passasse a significar o resultado do compartilhamento de elétrons em pares associado a um aumento da estabilidade¹⁷ dos átomos de acordo com a regra do octeto. Embora a ligação comece a ganhar características próprias (*i.e.*, ser o compartilhamento de par de elétron) ainda é um fenômeno que ocorre com o átomo para que esse adquira uma estabilidade maior.

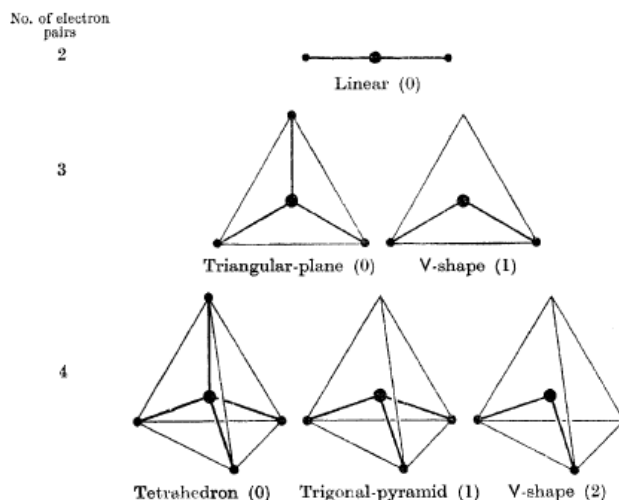
A ideia de que pares de elétrons compartilhados constituem uma ligação covalente e mantêm átomos unidos foi fundamental para o desenvolvimento de uma série de trabalhos, principalmente, durante a década de 1920. Mesmo enquanto outras teorias se desenvolveram, como se discute a seguir, a proposta de Lewis continuou a contribuir durante as décadas posteriores.

Um grande exemplo é o modelo da Repulsão dos Pares de Elétrons na Camada de Valência (do inglês, VSEPR¹⁸) para explicar a geometria molecular que foi, e ainda é, extremamente prático. Esse modelo apresenta que os pares de elétrons mais externos, participantes ou não de uma ligação covalente, estão o mais distante possível entre si e isto é o suficiente para prever geometria de uma dada molécula. A repulsão entre as cargas dos elétrons faz com que a molécula se ajuste em determinadas geometrias. Devido à relativa simplicidade do modelo e sua capacidade de previsão, foi prontamente aceito e compartilhado pela comunidade científica. O trabalho que deu origem a essa ferramenta foi desenvolvido por Sidgwick e Powell (1940) e aprimorado, para outras moléculas, por Gillespie e Nyholm (1957). Na Figura 10, podemos ver uma representação de como seria uma molécula considerando a repulsão eletrônica. Os números do lado esquerdo são os pares de elétrons de valência (mais externos) presentes na molécula e os números dentro dos parênteses são os pares de elétrons que não participam da ligação.

¹⁷ Segundo a Teoria de Lewis.

¹⁸ *Valence Shell Electron Pair Repulsion*.

Figura 10 - Geometria molecular considerando a repulsão entre pares de elétrons de valência.



Fonte: Gillespie e Nyholm (1957, p. 341).

Para utilizar o modelo VSEPR e encontrar a possível geometria de uma molécula em estudo, é necessário partir do modelo de Lewis e analisar os pares de elétrons ao redor do átomo central, comumente chamados de elétrons de valência. Todos os elétrons (ligantes ou não) devem ser levados em consideração, mas apenas a quantidade de ligantes influencia no nome dado à geometria. Embora o modelo se apresente bastante útil, ele é exclusivamente qualitativo e não prevê com exatidão todos os ângulos determinados empiricamente (MCGRADY; DOWNS, 2000).

Dada a discussão apresentada, é possível afirmar que a formação de uma ligação, concebida a partir da ideia de compartilhamento de elétrons em pares, foi um grande marco na história do desenvolvimento do conceito de ligação covalente. Além de explicar a existência de algumas moléculas, era possível prever suas geometrias, com algumas aproximações. No entanto, pouco se sabia sobre a natureza da estabilidade provinda do compartilhamento de elétrons. Foi a partir das descrições mecânico-quânticas, das quais podemos citar, da molécula de hidrogênio por Walter Heitler e Fritz London (método ligação-valência¹⁹) e também por Edward Condon (método orbital-molecular²⁰) (PAULING, 1960), que a ligação em si passou a ganhar destaque nas pesquisas.

Após avançarmos até a década de 1940, com o modelo de VSEPR, voltamos historicamente alguns anos para explorar alguns trabalhos que buscam

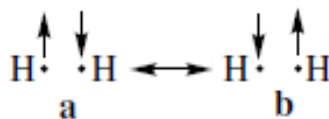
¹⁹ *Valence-bond method* (tradução livre).

²⁰ *Molecular-orbital method* (tradução livre).

entender explicitamente a ligação covalente, pois sua estabilidade permaneceu um mistério até o fim da década de 1920, quando a mecânica quântica passou a integrar os programas de pesquisa. Dessa forma, a ligação em si começa a ganhar mais atenção nas pesquisas da área, que passam a explorar a natureza da conexão entre os átomos. Nesse período, a mecânica quântica permite uma abordagem nova para o entendimento de átomos, moléculas e ligações nas pesquisas. A natureza dual do elétron e, especificamente, seu comportamento ondulatório passa a contribuir para um melhor entendimento das ligações covalentes.

Em 1927, Walter Heitler e Fritz London (SHAIK; HIBERTY, 2008) publicam um trabalho descrevendo a molécula de hidrogênio utilizando uma abordagem da mecânica quântica de forma diferente de Condon. O resultado é a descrição da molécula com base em contribuições de ressonância entre duas combinações diferentes de spins, utilizando, para isso, a função de onda que ficou conhecida como o método “*HL-wave function*”. O tratamento utilizado por Heitler e London é considerado protótipo do método ligação-valência (PAULING, 1960), no qual os elétrons participantes da ligação pertencem e permanecem nos átomos que se ligam. Na Figura 11, é possível ver a representação utilizada pelos autores para indicar a descrição de uma molécula com base nas contribuições de duas formas de ressonância com elétrons de spins opostos. No ano seguinte, London estendeu a *HL-wave function* para outros sistemas de moléculas e determinou os princípios gerais da ligação covalente em termos de ressonância entre formas iônicas. A pesquisa teve como base o trabalho desenvolvido por Heisenberg²¹ (1926 *apud* SHAIK; HIBERTY, 2008), no qual o físico apresenta a abordagem de ressonância aplicada a multicorpos. De modo geral, a ressonância a que nos referimos nesse caso são as contribuições energéticas, nesse caso, idênticas, de cada espécie.

Figura 11 – Representação das contribuições de ressonância para a molécula de hidrogênio.



Fonte: Shaik e Hiberty (2008, p. 3).

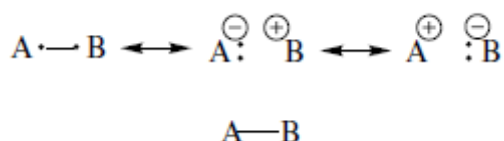
²¹ HEISENBERG, W. Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, v. 38, n. 6-7, p. 411-426, 1926.

Como é possível perceber na representação da Figura 11, apesar das novas abordagens descrevendo o comportamento da ligação, a comunidade científica não se desvincula por completo das ideias anteriores sobre compartilhamento de pares de elétrons. Ao contrário, como apontado por Shaik e Hiberty (2008), os primeiros trabalhos ainda mantêm algumas ideias intactas e, apenas mais tarde, com o desenvolvimento de outras teorias, é que começam a se afastar de tais ideias.

O que podemos traduzir desse momento histórico é que havia uma busca por descrever algo até então pouco conhecido: o compartilhamento de pares eletrônicos entre átomos, e a ferramenta disponível na época era a mecânica quântica. As contribuições de Heisenberg e Schrödinger, com a mecânica quântica, e de Heitler e London, com a descrição da molécula de hidrogênio, possibilitaram um novo programa de pesquisa especificamente para as ligações covalentes.

O aparente sucesso da *HL-wave function* e sua relação com os modelos de Lewis serviu para Linus Pauling e John Slater elaborarem uma teoria quântica geral para moléculas poliatômicas (SHAIK; HIBERTY, 2008): a Teoria da Ligação de Valência (TLV). Seus trabalhos incluíam as noções de hibridização de orbitais, sobreposição covalente-iônica e ressonância. Na Figura 12, vemos o esquema proposto por Pauling utilizando a sobreposição da *HL-wave function* e os híbridos de ressonância para o composto. A contribuição de Pauling foi associar um valor energético a cada forma, quantificando as funções de onda para os híbridos de ressonância (SHAIK; HIBERTY, 2008).

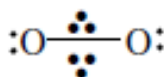
Figura 12 - Esquema proposto por Pauling para descrever a ressonância da ligação.



Fonte: Shaik e Hiberty (2008, p. 4).

No método ligação-valência (PAULING, 1960) utilizado por Heitler, London e, mais tarde, como base para a TLV, os cálculos partem da descrição da molécula como possuindo núcleos atômicos que se combinaram e na qual os elétrons ainda são parte dos átomos que se ligaram (BAND; AVISHAI, 2013). Como no caso da molécula de hidrogênio (H₂) em que podemos descrevê-la a partir da combinação da equação que trata cada átomo individualmente. Pauling ainda descreveu as ligações no diborano, a descrição da molécula com número de elétron ímpar (H₂⁺) e as duas ligações de três elétrons da molécula de oxigênio, como mostrada na Figura 13.

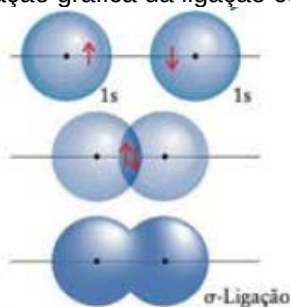
Figura 13 - Molécula de oxigênio descrita por Pauling.



Fonte: Shaik e Hiberty (2008, p. 4).

A forma específica desses trabalhos de interpretar uma estrutura molecular, descrevê-la em equações da mecânica quântica e todas suas deduções qualitativas, principalmente quanto ao processo de formação da ligação covalente, constituem a Teoria da Ligação de Valência. Nesta, os elétrons são considerados como estando localizados em orbitais atômicos, que podem ser descritos a partir da resolução da equação de Schrödinger e dão origem às funções de onda específicas para cada sistema. A ligação é uma sobreposição dos orbitais atômicos que podem ser representados graficamente, como na Figura 14, quando as funções de onda são associadas a uma probabilidade.

Figura 14 - Representação gráfica da ligação covalente a partir da TLV.



Fonte: Atkins e Jones (2012b, p. 105).

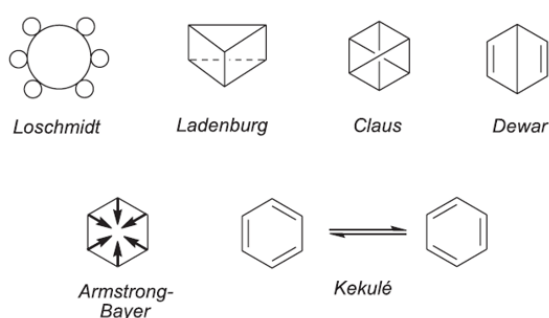
A partir da combinação das equações que descrevem os orbitais atômicos, é possível interpretar que, na formação da molécula, esses orbitais se sobrepõem formando uma nova região no espaço onde é mais provável encontrar o elétron. Quanto maior for a sobreposição, maior será a estabilização relacionada àquele sistema.

Em um primeiro momento, as pesquisas desenvolvidas buscaram descrever moléculas ainda na lógica do modelo de Lewis (*i.e.*, de que a ligação é estabelecida a partir do compartilhamento de pares de elétrons). Porém, como a TLV permite uma abordagem mais complexa, envolvendo funções matemáticas e o conceito de orbital, outras formas de interpretar a ligação se tornam possíveis. A ligação passa de uma concepção relacionada à estabilidade do compartilhamento de elétrons em pares para a análise de um sistema composto de átomos ou íons em que a quantidade de núcleos e elétrons pode variar. Por exemplo: ligação de um elétron na molécula-íon H_2^+ e ligação de três elétrons e dois núcleos (centros) na molécula de O_2 . Isso

permite uma ampliação do conceito e a possibilidade de analisar mais tipos de sistemas e a incorporação de princípios fundamentais como a ressonância.

Caramori e Oliveira (2009), em sua discussão sobre o desenvolvimento do conceito de aromaticidade, apresentam algumas ideias associadas ao conceito de ressonância. Segundo os autores, a discussão sobre estruturas, que antecedeu o conceito de ressonância, data da época do fim do século XIX, com os trabalhos de Kekulé e semelhantes. Esses trabalhos pretendiam ilustrar, principalmente, a estrutura do benzeno. Na Figura 15, podemos ver algumas dessas propostas.

Figura 15 – Propostas de estruturas para o benzeno.



Fonte: Caramori e Oliveira (2009, p. 1873).

Destacamos a proposta de Kekulé, no canto inferior direito, com o símbolo utilizado para equilíbrio. A estrutura que mais se aproxima do jeito que utilizamos hoje era entendida como um equilíbrio entre as formas do benzeno. Porém, logo no início do século XX, entendeu-se a molécula a partir de estruturas canônicas de ressonância (CARAMORI; DE OLIVEIRA, 2009). Ainda segundo os autores, a ressonância passa a ganhar um significado especial no trabalho de Linus Pauling, como destacamos anteriormente, ao produzir experimentos que possibilitavam calcular as energias de ressonância. O conceito ainda foi utilizado em diversos métodos de cálculos, dos quais citamos a Energia de Ressonância de Dewar (ERD) e Energia de Ressonância de Hess-Schaard (HSRE).

Embora muito foi incorporado pela comunidade científica, a TLV também apresentou suas limitações. Entre elas, a mais disseminada talvez seja a descrição da molécula de oxigênio. Aparentemente, a TLV não seria capaz de explicar o comportamento paramagnético da molécula e, para isso, seria necessário recorrer à outra teoria. Este comportamento necessita que os elétrons estejam desemparelhados e uma análise mais simplista da molécula, a partir da TLV, leva-nos a uma conclusão precipitada: a TLV não prevê o paramagnetismo da molécula

de oxigênio (O₂). Para Shaik e Hiberty (2008), essa primeira análise simplista ocorre porque consideramos o estado fundamental da molécula diferente do que é apontado pelos dados empíricos de cálculos computacionais. Segundo os autores, o simples pareamento a partir do modelo de Lewis nos leva ao estado fundamental um singleto, representado como “¹Δ_g”²², uma molécula com orbitais hibridizados e elétrons perfeitamente compartilhados. No entanto, como apresentado por Goddard *et al.*²³ (*apud* SHAIK; HIBERTY, 2008), o estado fundamental que melhor representa a molécula de oxigênio é o tripleto, representado como “³Σ_g”. Uma mudança no estado fundamental leva a uma interpretação da molécula possuindo dois elétrons desemparelhados e, portanto, paramagnética. Para isso, é necessário analisar a formação da ligação a partir de elétrons que ocupam orbitais. A ligação covalente na molécula de oxigênio, em específico, pode ser entendida como duas sobreposições de dois orbitais paralelos, com três elétrons cada (SHAIK; HIBERTY, 2008). Essa configuração, compartilhamento de três elétrons, leva a um balanço maior entre atração e repulsão, gerando um estado fundamental diferente do que era considerado apenas com a atração. Para Shaik e Hiberty (2008), a aparente falha na descrição da molécula de oxigênio a partir da TLV, como vimos, não tem base científica. Contudo, os autores apresentam que a primeira descrição da molécula, de uma forma simplista, foi utilizada nos anos que se seguiram para deslegitimar a TLV e favorecer a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Em relação à Teoria de Lewis, a Ligação de Valência representa um grande avanço no entendimento da estabilidade associada ao compartilhamento de elétrons em pares, através do pareamento de spins opostos. Embora seu começo seja marcado pela relação direta com as concepções de ligação de Lewis (*i.e.*, o de compartilhamento de elétrons em pares entre dois átomos) e que até então era associada a um racionalismo clássico, a TLV se apresenta como uma relação ainda mais complexa de conceitos, da física, da química e da matemática, permitindo a interpretação de um número maior de sistemas. Isso nos leva a identificar que a TLV representa uma concepção diferente da de Lewis e, portanto, atribuída a uma visão que chamamos de racionalismo moderno. Este é caracterizado por uma mudança nas concepções acerca da teoria e um maior número de relações entre conceitos.

²² Estes símbolos fazem referência a uma configuração específica dos elétrons em orbitais.

²³ GODDARD, W. A. *et al.* Generalized Valence Bond Description of Bonding in Low-Lying States of Molecules. **Accounts of Chemical Research**, v. 6, n. 11, p. 368-376, 1973.

Além disso, uma grande diferença é que a TLV, diferente do essencialismo atribuído à concepção de Lewis, não está limitada ao compartilhamento de *pares* eletrônicos entre *dois* núcleos. Essa ruptura começa a aparecer no racionalismo clássico, pois nem todas as ligações eram como Lewis previu, mas ganha ainda mais força no racionalismo moderno com os métodos de cálculos que permitiam considerar vários tipos de sistemas. O racionalismo moderno também representa uma ruptura quanto à natureza do elétron que, até então, era interpretado apenas como uma partícula. O dualismo onda/partícula permitiu uma interpretação bastante diferente do racionalismo clássico, ao introduzir conceitos como sobreposição e orbitais.

Da mesma forma que os métodos utilizados por Heitler e London levaram ao desenvolvimento de uma teoria para a descrição mecânico-quântica, o trabalho de Edward Condon é tido como o primeiro caso de uso da abordagem de orbital molecular no cálculo de energia e tamanho da ligação na molécula de hidrogênio (MURRELL, 2012). A partir do tratamento da molécula-íon H_2^+ , desenvolvido por Oyvind Burrau utilizando a equação de Schrödinger, Condon introduziu 2 elétrons aos orbitais já descritos. Considerando as energias envolvidas (repulsão entre cargas iguais e atração entre cargas opostas), propôs partir da repulsão dos elétrons como uma fração de energia de repulsão presente em um átomo de hélio, ponderando como se os dois prótons da molécula de hidrogênio correspondessem a um único núcleo (PAULING, 1960). A aproximação utilizada permitiu o cálculo da energia da ligação na molécula e sua distância. Apesar da incerteza relacionada às limitações em considerar as energias de repulsão como idênticas nos dois casos (molécula de hidrogênio e átomo de hélio), os resultados foram muito próximos do esperado. O método, utilizado por Condon, que envolve considerar elétrons sendo distribuídos em orbitais e que se estendem por toda a molécula, é considerado o protótipo das abordagens orbital-molecular.

Ainda no final da década de 1920, os trabalhos de Friedrich Hund e Robert Mulliken em espectroscopia permitiram o desenvolvimento de uma nova abordagem para a estrutura eletrônica (SHAIK; HIBERTY, 2008). Baseada em diagramas de correlação entre a energia de átomos separados e unidos, o trabalho permitiu a atribuição de números quânticos aos elétrons presentes na molécula. Em sistemas mais complexos, inviáveis de serem descritos em termos numéricos, a abordagem consiste em uma expansão de termos em funções específicas (MURRELL, 2012), das quais, as mais utilizadas são as que envolvem orbitais atômicos (*i.e.*, descrição

da molécula a partir de núcleos atômicos). Para isso, a abordagem parte do princípio de que, próximo ao núcleo, as funções de onda dos orbitais moleculares devem ser semelhantes ao orbital atômico, permitindo o uso da combinação linear de orbitais atômicos (do inglês, LCAO²⁴) para descrever os orbitais moleculares. Em 1929, utilizando desse princípio, John Lennard-Jones descreveu uma série de moléculas em função de orbitais moleculares. Foi também nesse trabalho que o pesquisador apontou pela primeira vez a aparente falha da TLV em explicar o paramagnetismo da molécula de oxigênio. Mesmo com alguns esforços posteriores em mostrar que essa conclusão poderia estar equivocada, como dito, ela acabou por contribuir, de modo geral, com o esquecimento da TLV por alguns anos.

Em contraste com a descrição localizada de orbitais da TLV, a TOM passa a receber cada vez mais adeptos que acabam contribuindo com o seu desenvolvimento e disseminação. Em 1929, John Slater introduziu o uso de determinantes no cálculo da função de onda para moléculas com muitos elétrons, para que os termos pudessem ser simplificados (MURRELL, 2012).

No início da década de 1930, o trabalho de Erich Hückel fornece uma importante ferramenta aos adeptos do orbital molecular. Partindo das ideias de Lennard-Jones sobre a molécula de O₂, Hückel aplica as descrições a outras moléculas que possuem ligações duplas, sugerindo a separação σ - π ²⁵ delas (SHAIK; HIBERTY, 2008). O trabalho permitiu a explicação da estabilidade de moléculas como o benzeno e da formulação da regra de Hückel. Nas décadas seguintes, como apontado por Murrell (2012), os trabalhos envolvendo a TOM buscaram otimizar as funções que descrevem os orbitais. Dentre elas, a substituição de funções exponenciais por gaussianas que permitem reduzir o sistema à interação de dois centros e o limite de Hartree-Fock para a aproximação de um sistema a um único determinante de Slater.

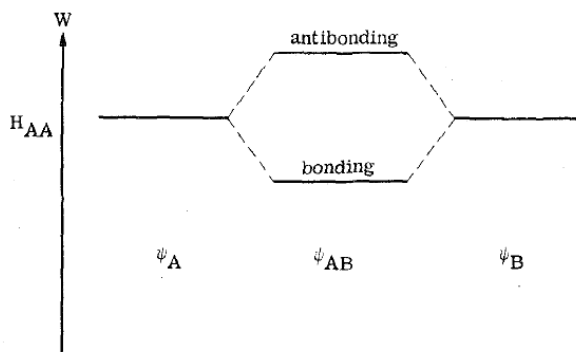
Como podemos verificar, a Teoria do Orbital Molecular representa uma forma de descrever a estrutura eletrônica de um sistema. Ela envolve o tratamento da molécula a partir da ocupação de elétrons em orbitais deslocalizados, calculado pela combinação linear dos orbitais atômicos. O resultado, dado em função dos

²⁴ *Linear Combination of Atomic Orbitals.*

²⁵ Esses símbolos são utilizados para diferenciar a sobreposição de orbitais frontalmente (σ) e lateralmente (π).

orbitais moleculares, pode ser representado como na Figura 16, para a molécula hipotética AB.

Figura 16 - Diagrama de energia do orbital molecular para a molécula AB.



Fonte: Ballhausen e Gray (1965, p. 20).

As linhas no diagrama, marcadas como *antibonding* e *bonding*, representam os níveis de energia dos orbitais moleculares em relação aos orbitais atômicos. São, respectivamente, os orbitais ligante e antiligante. Enquanto o primeiro representa uma diminuição da energia em relação ao átomo isolado, logo uma forma de estabilizar o novo sistema, o segundo representa um aumento na energia e, assim, uma forma de desestabilização. Pode aparecer ainda o orbital não-ligante, que tem energia semelhante aos átomos isolados e, portanto, no mesmo nível do orbital atômico no diagrama.

O procedimento que se segue é simplesmente adicionar os elétrons da molécula nos orbitais respeitando o princípio de exclusão de Pauli (BALLHAUSEN; GRAY, 1965), começando pelos orbitais ligantes e, posteriormente, os antiligantes. A teoria ainda permite calcular um número relacionado à estabilização do sistema molecular em relação aos átomos isolados, a chamada ordem de ligação (OL). Esta pode ser calculada como representado na equação 1, na qual N_e representa o total elétrons em orbitais ligantes e N_e^* o total de elétrons em orbitais antiligantes. Um número maior que 0 para a ordem de ligação indica que a molécula possui mais elétrons que estabilizam do que elétrons que desestabilizam o sistema.

eq. 1
$$OL = \frac{1}{2} (N_e - N_e^*)$$

O desenvolvimento da TOM permitiu a inserção de vários termos novos e interpretações para a ligação na molécula, como o conceito de um orbital antiligante,

que fornece um aumento de energia na formação da molécula, e a ordem de ligação, como um parâmetro de estabilidade.

Enquanto a Teoria da Ligação de Valência contribuiu para o entendimento da estabilidade relacionada aos pares de elétrons compartilhados em termos do pareamento de spins (ATKINS; JONES, 2012a), a Teoria do Orbital Molecular desenvolve uma ferramenta importante na descrição das estruturas eletrônicas. Ainda assim, as primeiras décadas que sucederam o desenvolvimento das teorias foram marcadas por suas rivalidades e não pela possível complementaridade. Em sua grande maioria, os trabalhos envolvendo métodos de cálculos para analisar as moléculas apresentam a ascensão do orbital molecular e a descensão na ligação de valência. Embora diversas tentativas tenham sido feitas por Linus Pauling para defender a TLV, grande parte da comunidade científica, durante as décadas de 1950 e 1960, preferiu adotar a TOM. As razões para essa escolha, como apresentado por Brush (1999), são os cálculos e aproximações que eram muito mais simples e permitiam analisar moléculas cada vez maiores e mais complexas, além da capacidade mais acurada de previsão de algumas propriedades e de ser bastante útil para os químicos.

Nas décadas seguintes, começo da década de 1970, com o desenvolvimento da computação, mais uma vez os orbitais moleculares se destacaram, pois a ligação de valência apresentou muitas dificuldades para ser implementada (CRAWFORD; SCHAEFER, 2007). Somente alguns anos depois é que o surgimento de novos métodos e programas seguindo a TLV, além da criação de modelos qualitativos, permitiram que a teoria não fosse completamente abandonada.

Embora muitos defendam a rivalidade entre elas, como era muito vista na época que surgiram e ao longo dos anos que se seguiram, as teorias também compartilharam semelhanças e aproximações entre si. Como apresentado por Shaik e Hiberty (2008), ambas as teorias têm bases na mecânica quântica e, por isso, podem compartilhar de algumas expressões de energia durante a realização de cálculos. No Quadro 7, podemos comparar as expressões utilizadas nas duas teorias, nas quais “ β ” e “S” representam as integrais de ressonância e de sobreposição, respectivamente.

Quadro 7 - Expressões de energia na TOM e na TLV.

Tipo de interação	Expressão da energia no orbital molecular	Expressão da energia na ligação de valência
1-elétron	$\beta / (1 + S)$	$\beta / (1+S)$
2-elétron	$2 \beta / (1 + S)$	$2\beta / (1+S^2)$
3-elétron	$\beta (1 - 3S) / (1 - S^2)$	$\beta (1 - 3S) / (1-S^2)$
4-elétron	$- 4\beta S / (1 - S^2)$	$- 4\beta S / (1 - S^2)$
repulsão tripleto	$- 2\beta S / (1 - S^2)$	$- 2\beta S / (1 - S^2)$

Fonte: adaptado de Shaik e Hiberty (2008, p. 57).

A despeito de suas diferenças, é possível afirmar que tanto a TLV quanto a TOM permitiram um avanço no entendimento da natureza da ligação entre os átomos. O desenvolvimento das teorias permitiu métodos de análise de sistemas cada vez mais complexos, possíveis aproximações e interpretações qualitativas, principalmente, no que interessava à comunidade química. Por outro lado, em relação à TLV, a TOM tem uma abordagem bastante diferente quanto à interpretação qualitativa da molécula. Ao passo que podemos identificar na TLV uma semelhança com a Teoria de Lewis, no que se refere à ligação covalente enquanto compartilhamento de elétrons entre átomos, a TOM oferece uma interpretação diferente. A molécula é entendida como unidade e todos os elétrons estão distribuídos em função de um sistema diferente do inicial. É uma distribuição de elétrons em orbitais deslocalizados que mantém núcleos unidos, desde que esse sistema seja favorável para isso.

Pelo fato de apresentar uma concepção de ligação diferente tanto da Teoria de Lewis como da TLV, propomos que a TOM estaria inserida no racionalismo contemporâneo. Esta classificação foi atribuída, pois essa nova concepção para a ligação covalente estabelece diversas relações com outros conceitos, representa uma concepção diferente das outras teorias e seu programa de pesquisa é atual. Essas concepções de ligação a partir da TOM representam uma ruptura com a Teoria de Lewis ao analisar todos os elétrons da molécula e não só aqueles que, até então, participam da ligação. Isso significa que há pouco sentido em falarmos de uma ligação entre átomos, como é possível no racionalismo clássico e moderno, com suas sobreposições direcionadas de orbitais. Ainda assim, podemos estabelecer uma aproximação das ligações individuais da Teoria de Lewis e da TLV para com a TOM. A ordem de ligação é uma aproximação numérica do que seria o total de ligações estabelecidas nas outras teorias. Uma maneira de obter um número, dentro de uma teoria que não depende da análise de ligações individuais.

Como última parte da história que estamos contando, apresentamos mais uma teoria que nasceu no século XX e faz parte do conceito de ligação covalente. No entanto, essa teoria oferece uma interpretação bastante específica, além de estar presente nas pesquisas mais atuais. O teorema de Pierre Hohenberg e Walter Kohn introduzindo o estado fundamental como um funcional da densidade eletrônica representa um grande avanço nas pesquisas que buscam um método de calcular as energias envolvidas em sistemas moleculares. Ao invés de uma função de onda para vários elétrons, que requer calcular todas as interações possíveis, a Teoria do Funcional da Densidade (do inglês, *DFT*²⁶) permite analisar um sistema a partir de um funcional²⁷ que a define (MURRELL, 2012).

Em sua revisão histórica da Teoria, Jones (2015) apresenta que o conceito de densidade eletrônica data de muito antes da DFT se consolidar, aproximando-se da época que associamos ao início da TLV e da TOM. Destacamos alguns avanços que estavam relacionados diretamente com os conceitos de ligação covalente. Começando por Hans Hellmann que, em 1933, apresentou o abaixamento de energia cinética ao considerar a deslocalização da função de onda de elétrons de valência, que foi confirmado por Klaus Ruedenberg, em 1962, mostrando que a formação da ligação é acompanhada de uma contração do orbital (JONES, 2015). Ruedenberg ainda dividiu o processo de formação de ligação em duas etapas: (i) uma contração da densidade eletrônica no átomo antes da ligação; e (ii) um abaixamento da energia cinética ao passo que os átomos são levados ao seu equilíbrio (JONES, 2015). Como pode ser ilustrado pela conclusão do trabalho de Edgar Bright Wilson, em 1962 (apenas dois anos antes do formalismo exato da DFT), já era conhecido pela comunidade científica que uma maneira acurada de calcular o funcional da densidade forneceria um método importante na determinação do estado fundamental:

A questão importante permanece: existe algum procedimento para calcular (a densidade) n que evita completamente o uso de um espaço 3N-dimensional? Tal procedimento pode abrir um caminho para uma enorme simplificação de cálculos moleculares. Por exemplo, seria muito mais simples expandir uma função de 4 dimensões do que uma função de onda 3N-dimensional (WILSON, 1962, p. 2233, tradução livre)²⁸.

²⁶ *Density Functional Theory*

²⁷ Função de uma função.

²⁸ "The important question remains: Does there exist some procedure for calculating (the density) n which avoids altogether the use of 3N-dimensional space? Such a procedure might open the way to

Essa nova interpretação nos permite analisar a molécula para além do compartilhamento de elétrons, sobreposição de orbitais ou ordem de ligação. Ela, por sua vez, demonstra uma forma de considerar a distribuição de carga por toda a molécula e está fortemente associada à concepção de nuvem eletrônica. Como apresentado por Jones (2015), o período que se seguiu após a formalização da DFT por Hohenberg e Kohn foi marcado por diversos trabalhos dedicados a resolver alguns problemas da Teoria, assim como aplicá-la a diferentes sistemas com diferentes métodos. Da sua interpretação qualitativa para a molécula, principalmente para os químicos, a DFT está muito próxima à TOM ao adotar as ideias de deslocalização eletrônica e de molécula como unidade. Apesar de suas diferenças, atribuímos a ambas as teorias uma visão do racionalismo contemporâneo, pois, além de compartilharem de uma interpretação para a molécula, são atuais.

Nos Quadros 8 e 9, podemos identificar os modelos ou teorias que estão relacionados à história do conceito de ligação covalente. A descrição permite um breve comentário, quais as principais concepções e as possíveis relações que podem ser estabelecidas. No item “ligação”, descrevemos como os defensores da teoria entendiam o conceito de ligação. No “elétron”, apresentamos qual a abordagem para o conceito. Neste, é possível identificar que o conceito de ligação covalente é antecessor aos estudos que se preocupavam com a natureza eletrônica. Além disso, apresentamos o início das abordagens que permitiram analisar o elétron a partir de uma abordagem dualista (onda/partícula). No “cientista”, apresentamos os principais nomes defensores das teorias e modelos. E, por último, os símbolos utilizados para a representação.

an enormous simplification of molecular calculations. For example, it would be tremendously simpler to expand a four-dimensional function than a 3N-dimensional wave function.”

Quadro 8 - Identificação dos modelos e teorias.

Tema epistemológico	Animista	Realismo			Empirismo	Essencialismo
Teoria/modelo	Afinidade	Dualismo eletroquímico	Teoria dos radicais	Teoria dos tipos	Teoria da Valência	Teoria de Lewis
Descrição	As substâncias ainda estão relacionadas a uma concepção contínua da matéria. A afinidade entre os compostos era medida comparativamente.	Compostos são formados com a combinação de pares: um eletropositivo e um eletronegativo.	Grupos de átomos que existem isoladamente e possuem propriedades intrínsecas.	Grupo de átomos que guardam propriedades químicas, não existem isoladamente e controlam a reatividade dos compostos. Origem nas reações de substituição.	Valen = força que une os átomos. União dos "radicais" com "tipos". Outros nomes: basicidade, atomicidade, equivalência, quantivalência, valência. União da Teoria dos Radicais e da Teoria dos Tipos.	Avanço da Teoria de Valência a partir do conhecimento da partícula elétron. A razão de dois elétrons constituírem uma ligação era desconhecida.
Ligação	Ligação entre substâncias associada a uma antropomorfização	Combinação resultando em composto neutro. Unitarismo (molécula como unidade)	União de radicais / poder de combinação	União de tipos / poder de combinação	União dos átomos	Compartilhamento de par(es) de elétron(s)
Elétron	-	-	-	-	-	Partícula
Cientistas	Boyle; Boerhaave; Geoffroy	Berzelius	Frankland; Wohler; Liebig	Dumas; Gerhardt; Williamson; Wurtz; Hofmann	Kekulé; Couper; Butlerov	Lewis;
Símbolos	-	-	Fórmulas; pontos	Fórmulas; colchetes; chaves	Traços; círculos	Pontos; traços

Fonte: elaboração própria.

Quadro 9 - Identificação dos modelos e teorias (continuação).

Tema epistemológico	Racionalismo clássico	Racionalismo moderno		Racionalismo contemporâneo	
Teoria/modelo	Expansão da Teoria de Lewis	Mecânica quântica (HL – <i>wavefunction</i>)	Teoria da Ligação de Valência (TLV)	Teoria do Orbital Molecular (TOM)	Teoria do Funcional da Densidade (do inglês, <i>DFT</i>)
Descrição	O compartilhamento de elétrons passa a estabelecer relações com outros conceitos e permitir outras possibilidades além dos pares eletrônicos	Descrição matemática/física da molécula.	Funções de onda como resolução para a equação que descreve os átomos / moléculas	Elétrons da molécula ocupam orbitais deslocalizados	Teoria do Funcional da Densidade para resolução de sistemas muito corpos.
Ligação	Compartilhamento de elétrons entre átomos	Combinação linear de orbitais atômicos	Sobreposição de orbitais atômicos. Ligação direcional.	Ordem de ligação e elétrons em orbitais ligantes, não-ligantes e antiligantes	Densidade eletrônica / nuvem eletrônica
Elétron	Partícula	Partícula/onda	Partícula/onda	Partícula/onda	Partícula/onda
Cientistas	Langmuir	Heitler; London	Linus Pauling; Slater; Rumer; Wheeland	Huckel; Mulliken; Hund	Hohenberg; Kohn
Símbolos	Ponto e traços	Dupla seta; pontos; setas de spin	Orbitais; diagramas	Diagramas	-

Fonte: elaboração própria.

Os dados da revisão narrativa nos permitiram analisar o conceito de ligação covalente a partir de um domínio genético sociocultural. Dessa forma, identificamos períodos históricos caracterizados pelo desenvolvimento de modelos e teorias. Embora nossa narrativa foi marcada cronologicamente, destacamos que seu desenvolvimento não seguiu de forma alguma uma linearidade acumulativa. Várias teorias continuaram a fazer parte dos trabalhos e publicações mesmo após a identificação de determinadas limitações. Assim como teorias rivais, a exemplo da Teoria dos Radicais e Teoria dos Tipos, continuaram se desenvolvendo por várias décadas conjuntamente até se unificarem na teoria de valência, considerada mais ampla e que já estava em desenvolvimento desde a metade do século XIX. Ou então apenas superadas, como aconteceu com o Dualismo Eletroquímico que passou a acumular muitas falhas de explicações, enquanto outras teorias eram capazes de explicar mais fenômenos.

Os Quadros 8 e 9 também apresentam conceitos como “mecânica quântica” que, mesmo não sendo uma teoria específica, identificamos um momento na história que esse desenvolvimento significou uma grande mudança na comunidade científica. Como no caso da ressonância, em que suas contribuições permitiram que se avançasse em até mais de uma teoria, antes da mecânica quântica e até depois dela. O resultado da revisão narrativa foi utilizado como base para a proposição do instrumento de coleta de dados empíricos desta pesquisa, o questionário apresentado no Apêndice 1.

Em relação à primeira questão norteadora da pesquisa, em destaque no início desta seção, podemos agora sintetizar o que identificamos de avanços e rupturas durante o desenvolvimento que contempla o conceito de ligação covalente. Esses avanços e rupturas foram marcados com compromissos epistemológicos que atribuímos como forma de identificar as possíveis diferenças de significados acerca do tema.

Inicialmente, durante os períodos que ainda contemplavam uma visão de matéria contínua, a ligação entre substâncias possuía um significado que rotulamos como um compromisso animista ao atribuir características humanas às substâncias. O primeiro avanço foi associado às pesquisas que envolviam a concepção do Dualismo Eletroquímico, embora ainda não tivessem como foco o estudo das ligações químicas, propriamente. De modo que, em uma gama de conceitualizações, como explanado, a natureza da estabilidade relacionada à ligação era algo

secundário e, com isso, refletia uma percepção realista do fenômeno. Isso não significa que outros conceitos não possam estar ligados a algo abstrato e que precisava de um modelo, como era com os átomos. Revela apenas que a própria ligação em si não compartilhava de um significado teorizado, pelo contrário, era algo que não era criticado ou explorado. Em relação ao conceito anterior de afinidade, o avanço do Dualismo Eletroquímico representa uma ruptura ao deixar de associar a ligação a características humanas, além de considerar uma concepção corpuscular para a matéria.

Seguindo, identificamos uma mudança no entendimento do conceito de ligação química a partir das teorias dos Radicais e dos Tipos. Isto, pois a ligação entre os átomos, nesse período, não é algo imutável como no dualismo eletroquímico, mas sim que depende das espécies que estão se ligando. Esse fenômeno pode ser sinalizado pelo conceito de *força de combinação*, utilizado na época para prever possíveis reações. Apesar disso, pouco se sabia sobre a ligação, que continuava sendo algo secundário, razão pela qual atribuímos ambas as teorias (dos Radicais e dos Tipos) e o Dualismo eletroquímico a um tema epistemológico realista.

Aproximando-se do fim do século XIX, a Teoria de Valência representa uma mudança em relação às outras, ao atribuir a ligação a um feito experimental: através dos cálculos de peso atômico, é possível chegar em um número relacionado com a quantidade de ligações que o átomo geralmente realiza. Devido a isso, atribuímos a esse período uma concepção empirista de ligação química. Esta passa a ser um número associado a um átomo com base experimental.

No início do século seguinte, a introdução do elétron, concebido como partícula, ao fenômeno da ligação química, permitiu um avanço ao seu entendimento. Há uma ruptura com a concepção de valência enquanto um dado empírico e passa-se a adotar a covalência como sinônimo de ligação a partir do compartilhamento de elétrons em pares. Isso permitiu a identificação de dois movimentos diferentes dentro da Teoria de Lewis, uma inicial, que chamamos de essencialismo, e uma posterior que se estendeu, que chamamos de racionalismo clássico. A primeira foi assim chamada, pois a ligação estava associada a uma qualidade essencial que a definia: a ligação covalente era, estritamente, o par de elétrons compartilhados. A segunda representa a ligação a partir de um conceito, o

compartilhamento de elétrons entre átomos, que pode estabelecer relações com outros conceitos e não está limitada a uma qualidade.

É possível identificar um movimento de ruptura, inicialmente, com o dado empírico (visão empirista), pois foi estabelecida uma qualidade ao conceito, sem necessidade de dados empíricos e, posteriormente, ao romper com o conceito enquanto uma característica (essencialismo). Essas mudanças da Teoria de Lewis representaram um grande avanço nas pesquisas que buscavam entender a ligação covalente e que deixou de ser algo secundário nas explicações teóricas acerca da constituição das moléculas e sistemas.

Alguns anos mais tarde, conjuntamente com o desenvolvimento da física, mais precisamente da mecânica quântica, a ligação covalente passa a receber ainda mais atenção do ponto de vista de responder a que estaria relacionada a estabilidade energética adquirida por átomos que se ligam. A abordagem utilizada por Heitler e London e, mais tarde, desenvolvida por Pauling representa uma ruptura com o racionalismo clássico ao partir de uma concepção dual para o elétron. A ligação covalente, que antes era concebida como o compartilhamento de elétrons (como partículas), passa a ser entendida como a sobreposição direcional de orbitais atômicos. Além disso, estabelece ainda mais relações com outros conceitos e permite a avaliação de uma quantidade maior de sistemas. Atribuímos a essas concepções de ligação covalente, um tema epistemológico de racionalismo moderno.

Outra teoria fundamentada na mecânica quântica é a Teoria do Orbital Molecular e representa um avanço ao permitir calcular as energias envolvidas na formação de uma ligação e de uma molécula. Apesar de ter se desenvolvido praticamente na mesma época que a TLV, logo no início, a TOM se apresentou como uma concepção diferente, rompendo com a ideia de ligação direcional. Os orbitais deslocalizados da Teoria permitem uma interpretação geral da molécula, apresentando sua estrutura eletrônica a partir de diagramas de energia. Esses diagramas mantêm uma semelhança com as demais teorias do racionalismo clássico e moderno ao permitir calcular a ordem de ligação. Esta é um paralelo, e geralmente idêntica, ao número de ligações direcionais. A partir dessas rupturas, as diversas relações estabelecidas com outros conceitos e a presença em trabalhos atuais, classificamos a TOM como inserida no racionalismo contemporâneo.

Por último, apresentamos a Teoria do Funcional da Densidade, que significou um grande avanço para a área e tem suas raízes na mecânica quântica, assim como a TLV e a TOM. A Teoria representa um avanço em relação ao racionalismo clássico e moderno ao se desprender da concepção estrita de ligação direcional, da mesma forma que foi com a TOM. Devido à sua interpretação qualitativa, de deslocalização dos elétrons, ser muito próxima da TOM, além da sua presença em trabalhos atuais, classificamos também como inserida no racionalismo contemporâneo.

Com a finalização de nossa revisão narrativa, enquanto um procedimento que respondesse à questão norteadora de pesquisa e que possibilitasse a abordagem do conceito a partir do seu domínio sociocultural, apresentamos, na seção seguinte, os resultados da revisão sistemática sobre as concepções alternativas associadas ao conceito de ligação química e, particularmente, ao conceito de ligação covalente. Os temas epistemológicos encontrados na revisão narrativa serviram de categorias para as concepções alternativas.

4.2 A ligação química no domínio ontogenético

Como as concepções que envolvem o conceito de ligação química, identificadas na literatura, fundamentam o processo de criação do perfil conceitual e como essas concepções aparecem nos microprocessos em um contexto específico?

4.2.1 Revisão Sistemática sobre concepções alternativas

A partir do procedimento apresentado anteriormente, os trinta e um (31) artigos que foram selecionados para compor o resultado da revisão sistemática apresentam de forma evidente as concepções alternativas identificadas em seus sujeitos de pesquisa em um determinado contexto. Nessa revisão, não consideramos qual a definição do pesquisador sobre concepções alternativas e nem a justificativa do porquê aquelas concepções identificadas são consideradas alternativas à ciência. Ainda assim, é possível afirmar que as concepções refletem a relação do conceito com a história do aluno.

No total, identificamos duzentas e cinquenta e quatro (254) concepções sobre ligação química que foram organizadas em frases mais abrangentes para contemplar as repetições que muitas vezes não possuíam descrição idêntica. Por exemplo, a concepção “a formação da ligação envolve um fornecimento de energia” é semelhante à “é necessário fornecer energia para unir os átomos”, embora não estejam escritas da mesma maneira. Como o objetivo é identificar as concepções reportadas na literatura, tal trabalho de síntese se faz necessário uma vez que não há uma única maneira de reportar a concepção do aluno sobre o tema. Além disso, também foram encontradas concepções com o texto idêntico, no qual o autor apresentou que o resultado encontrado em seu trabalho corrobora a literatura de referência do texto. Após as etapas de tradução e síntese das concepções, vinte e três (23) concepções foram excluídas (Apêndice 3) da classificação por não representarem uma ideia de ligação, diretamente.

Assim, apresentamos, a seguir, um total de cento e uma (101) concepções relacionadas com ligação química. Essas concepções alternativas foram agrupadas de acordo com as ideias características de cada tema epistemológico identificados

na seção anterior, ou seja, de acordo com o significado de ligação. Isso significa que, mesmo apresentando um termo associado a uma determinada teoria específica, a concepção alternativa não necessariamente apresenta o mesmo tema epistemológico. Como exemplo utilizando o termo orbital, a concepção alternativa pode expressar uma ideia animista, realista ou empirista mesmo sem ter sido parte do desenvolvimento dos trabalhos associados a esses compromissos. Assim, foi possível extrair quais conceitualizações podem ser identificadas em relação à ligação covalente. Podemos identificar também concepções de ligação química, ligação metálica, ligação iônica, elétrons e átomos. Em seguida, passamos a comparar esses dados com os dados da revisão narrativa, de forma a estabelecer um paralelo e reconhecer, na história, uma possível origem para tais concepções.

Quadro 10 - Concepções do tema epistemológico animista.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
ANIMISTA	Átomos querem formar substâncias Átomos querem formar ligações para ficarem mais estáveis Átomos querem formar ligações para atingirem o octeto

Fonte: elaboração própria.

O tema epistemológico animista foi identificado a partir das ideias sobre Afinidade entre substâncias e reflete a atribuição de características humanas. Todas as concepções classificadas, apresentadas no Quadro 10, incluem a palavra “querem”, a qual pode estar relacionada com algum tipo de vontade que o átomo possui. Elas foram identificadas com base nos trabalhos de Kabapinar (2013), Luxford e Bretz (2014), Kind (2014), Temel e Özcan (2016) e Shoopman e Jenkins (2019). Assumindo esse sentimento como uma qualidade do ser humano, classificamos essas concepções de acordo com o mesmo tema epistemológico dos trabalhos envolvendo a Afinidade. Embora utilize termos como “átomos” e “octeto”, que só apareceram muitos anos depois na comunidade científica, a concepção de ligação enquanto uma vontade do átomo representa uma semelhança com o que se constatou da revisão narrativa. Destacamos também que as concepções classificadas como animista ilustram fortemente o apelo a características humanas como forma de explicação de um fenômeno, mesmo após o contato com conceitos científicos.

Quadro 11 - Concepções do tema epistemológico realismo.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
REALISMO	Ligação covalente é formada entre ametais Ligação covalente ocorre entre metais e gases nobres Ligação covalente acontece entre íons e moléculas Ligação covalente apolar porque os átomos são iguais Moléculas apolares se formam apenas quando os átomos na molécula têm eletronegatividade parecida A diferença de eletronegatividade fornece a polaridade da molécula Ligação covalente polar é formada quando as eletronegatividades dos átomos são diferentes A polaridade da ligação depende do número de elétrons de valência de cada átomo envolvido na ligação Ligação covalente apolar quando a diferença de eletronegatividade é pequena Molécula é polar devido às ligações covalentes polares As propriedades da substância determinam o tipo de ligação Os tipos de ligação determinam as propriedades da substância A estabilidade de uma molécula explicada como a forma que prevalece na natureza Ligação iônica é formada entre metais e ametais Ligação covalente e iônica com base nos elementos sendo metal ou ametal
	Ligação covalente é uma força que mantém os átomos unidos Ligação covalente apolar porque a força de atração dos átomos é igual As forças que mantêm os átomos juntos na ligação ocorrem devido a diferença de eletronegatividade
	Estrutura de Lewis pode ser utilizada para ambos os tipos de ligação (iônica e covalente) Compostos iônicos formados por ligações iônicas e compostos moleculares por ligações covalentes Ligação covalente é uma ligação intramolecular Há apenas dois tipos de ligação: covalente e iônica Ligação covalente é uma ligação simples Ligação coordenada como um tipo de ligação covalente Tamanho da ligação depende do tipo de ligação Ligação covalente é mais fraca que a ligação iônica Ligação covalente é mais forte que a ligação iônica TLV é válida apenas para ligação covalente Hibridização é um tipo de ligação covalente Espaçamento igual indica mesmo tipo de ligação
	Ligações covalentes são estruturas (possuem massa, volume) que mantêm átomos unidos e podem sofrer alterações Ligações covalentes e iônicas são quebradas durante o processo de dissolução Ligações covalentes se quebram durante as passagens de estado físico
	Não há interação entre moléculas
	Reações são recombinações de átomos

Fonte: elaboração própria.

O tema epistemológico realista foi identificado como um avanço em relação às ideias animistas da Afinidade, pois não apresenta antropomorfização em seus conceitos. A principal característica atribuída a esse compromisso foi seu entendimento de ligação como algo secundário (não era o foco nas pesquisas) e que ocorre entre um grupo de substâncias. As concepções, apresentadas no Quadro 11, foram identificadas com base nos trabalhos de Nicoll (2001), Özmen, Demircioglu e Demircioglu (2009), Kelly, Krause e Baker (2010), Kind (2014), Temel e Ozcan (2016) e Sen, Varoglu e Yulmaz (2019). Podemos identificar em concepções como “[...] é formada entre ametais”, “[...] ocorre entre metais e gases nobres” e “[...] acontece entre íons e moléculas” a falta de uma definição para o conceito, da mesma forma que ocorreu para as teorias dos Tipos e Radicais. Com a diferença que antes a ligação acontecia entre Tipos e Radicais e, nesse momento, ocorre entre outras espécies, como metais, ametais, gases nobres *etc.* A definição apresenta uma dependência do conceito de ligação em atribuir como a propriedade de outro conceito, mas que em nenhum momento na revisão narrativa encontramos um paralelo, como associar ligações às classificações dos elementos na tabela periódica. Por isso, identificamos como parte de uma visão realista que, na tentativa de definição acaba informando pouco sobre a própria ligação, atribuindo-a a alguma outra classificação sem fundamento.

As concepções envolvendo o termo “força”, como em *“Ligação covalente é uma força que mantém os átomos unidos”*, também reproduzem a ideia realista de pouco informar sobre a natureza da ligação, porém atribuem a elas um conceito não muito bem definido. Essas concepções estão diretamente relacionadas com a visão da história associada ao realismo, ilustradas no pensamento de Frankland, segundo o qual não existia algo como a ligação enquanto um ente concreto, apesar das representações, essa era uma força que mantinha os átomos unidos, assim como os planetas no sistema solar (CLAPP, 1957).

Outras concepções identificadas dentro do realismo são as que limitam a definição de ligação apenas como um tipo, uma classificação e, mais uma vez, sem muita informação. Como destacado em *“Há dois tipos de ligação: covalente e iônica”* e *“[...] depende do tipo de ligação”*. Isso reflete uma visão classificatória para as ligações que se dividem cada vez mais, por exemplo, a ligação química em iônica, covalente e metálica; a ligação covalente em coordenada, simples *etc.*

As concepções como *“Ligações covalentes são estruturas [...]”* e *“Ligações covalentes se quebram [...]”* além de não informar muito sobre a natureza da constituição da ligação, como nas anteriores, atribui uma visão materialista para o fenômeno. A primeira em destaque se repete para várias teorias, sempre atribuindo a ligação a um ente concreto, em uma ontologia material, ao qual estão associadas ações que podem ocorrer com objetos como se dobrar, amassar, esticar *etc.* Embora saibamos que as ligações, em uma concepção racionalista, são concebidas como tendo movimento que pode ser descrito em formas de vibração (ATKINS; JONES, 2012a; MAHAN; MYERS, 1995), referimo-nos aqui a uma concepção específica de associar os eventos macroscópicos ao que acontece na ligação. Por exemplo, dobrar um papel ser acompanhado pela mesma dobra nas ligações, ou então uma torção ser o resultado da torção idêntica nas ligações.

Em *“Não há interações entre moléculas”* fica evidente a comum visão de simplificarmos o fenômeno da formação da ligação química como algo isolado, acontecendo apenas a uma molécula. Assim como em *“Reações são recombinações de átomos”* que, além de reproduzir um sistema isolado, que ocorre apenas o que está na equação química, mostra uma ausência de qualquer possível definição de ligação química ou covalente. Isso se mostrou bastante presente durante a nossa revisão narrativa, nas teorias realistas e se repete nas concepções alternativas dos alunos.

Destacamos ainda que algumas concepções começam com a frase *“Ligação covalente é [...]”*, no entanto se limitam a descrever a ligação como um fenômeno, em uma ontologia de processos (eventos), dependente de uma outra classificação (metal, ametal *etc.*) para os átomos, ou seja, não descreve especificamente a ligação. Além disso, a concepção de “covalente” para o fenômeno não estabelece uma relação direta com qualquer teoria das que classificamos como racionalismo clássico, período no qual o termo começa a fazer parte dos trabalhos.

Quadro 12 - Concepções do tema epistemológico empirismo.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
EMPIRISMO	O tamanho da ligação é a distância entre os átomos O tamanho da ligação não é a distância entre os átomos Ligações são formas de armazenar energia, a quebra da ligação libera a energia armazenada A formação da ligação pode liberar ou absorver energia Quando a ligação química é formada, libera-se energia É necessário fornecer energia para formar e quebrar uma ligação

Fonte: elaboração própria.

O tema epistemológico de empirismo foi identificado a partir dos trabalhos que buscavam associar a ligação a um dado empírico. As concepções alternativas associadas a ele, apresentadas no Quadro 12, refletem a atribuição de propriedades obtidas experimentalmente e estão de alguma forma relacionadas às ligações químicas. Elas foram identificadas com base nos trabalhos de Boo (1998), Toplis (2008), Othman, Treagust e Chandrasegaran (2008) e Zohar e Levy (2019). As concepções sobre tamanho da ligação estão associadas a uma atribuição direta de valor para a ligação. Representa uma visão empirista por refletir sobre o conceito a partir de um número e atribuir uma qualidade com base nisso. O mesmo pode ocorrer com a atribuição de um número relacionado ao seu conteúdo energético, pois este pode ser classificado de acordo com a energia necessária para quebrar a ligação, obtida de forma experimental.

Embora a revisão narrativa tenha representado essa visão empirista associada ao conceito de valência como um número obtido a partir dos cálculos de peso atômico, as concepções classificadas aqui não apresentam relações com esses conceitos. Por outro lado, são semelhantes quanto à atribuição de um valor empírico à ligação, resumindo-a a um número.

O tema epistemológico de essencialismo foi identificado na definição de ligação covalente enquanto um par de elétrons. Isso representa uma visão da interpretação do fenômeno a partir de uma atribuição de característica a ele. As concepções, apresentadas no Quadro 13, envolvem a ligação como um (ou mais) par de elétron, necessariamente. Elas foram identificadas com base nos trabalhos de Salah e Dumon (2014), Atabek-Yigit (2015) e Nimmermark *et al.* (2016). Destacamos que, embora essa concepção essencialista tenha sido identificada nos primeiros

trabalhos de Lewis, ela pode permanecer e se estender a outras teorias. Como apresentamos na revisão narrativa, as outras teorias racionalistas se ocuparam em descrever moléculas com ligação envolvendo elétrons em pares, a diferença é que não ficaram limitadas a isso. Embora, mais uma vez, utilizem termos específicos de outras teorias que na seção anterior estavam fora do essencialismo, essas concepções mostram que a visão identificada nesse tema epistemológico se estende para além de Lewis. Como é possível verificar em “*Orbital atômico é um par de elétrons*” e “*Hibridização é a combinação de dois elétrons [...]*”.

Quadro 13 - Concepções do tema epistemológico essencialismo.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
ESSENCIALISMO	Ligação covalente envolve par(es) de elétrons Orbital atômico é um par de elétrons Linhas representam ligações covalentes a partir do compartilhamento de pares de elétrons Hibridização é a combinação de dois elétrons de átomos diferentes

Fonte: elaboração própria.

O tema epistemológico racionalista clássico foi identificado a partir dos trabalhos de Lewis e Langmuir e representa uma das primeiras formas de conceituar especificamente a ligação a partir de uma rede de conceitos. As concepções, apresentadas no Quadro 14, passam a refletir uma visão que depende da relação com outros conceitos, utilizados nesse caso de forma mais coerente com as teorias na revisão narrativa e que marcam a passagem para o racionalismo. Elas foram identificadas com base nos trabalhos de Birk e Kurtz (1999), Salah e Dumon (2011), Nimmermark *et al.* (2016), Eymur e Geban (2017) e Zohar e Levy (2019).

A primeira concepção em destaque é sobre a ligação iônica e descreve o processo de formação a partir de dois átomos que se ligam por compartilhamento de elétrons, formam uma molécula que, por sua vez, interage com as demais através de ligações intermoleculares. Isso reflete uma visão da ligação covalente como a única espécie de interação possível entre átomos, a partir do compartilhamento de elétrons, mesmo em compostos iônicos.

Quadro 14 - Concepções do tema epistemológico racionalismo clássico.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
RACIONALISMO CLÁSSICO	Ligação iônica envolve formação de moléculas, compartilhamento de elétrons e interações intermoleculares Ligação como mistura de compartilhamento e transferência de elétrons Ligação como atração entre elétrons (que podem ter carga positiva) A quantidade de elétrons de valência determina quão eletronegativo o átomo vai ser Elétrons se movem entre os átomos da ligação Elétrons ficam parados entre os núcleos mais próximos do átomo mais eletronegativo Elétrons se movem ao redor do núcleo Uma molécula apolar tem um momento dipolo resultante maior que 0 Todas ligações na molécula polar são polares se ocorrerem na mesma direção Moléculas assimétricas com ligações polares são polares Moléculas são polares pois os elétrons não ligantes podem formar uma carga negativa parcial
	Pares de elétrons não ligantes influenciam na posição de pares de elétrons compartilhados e determinam a polaridade da ligação Oxigênio possui 8 elétrons de valência por causa da regra do octeto Átomos podem compartilhar tantos elétrons quanto tiverem em sua camada de valência O átomo maior exerce maior influência no par de elétron compartilhado Ligação covalente é compartilhamento de elétrons entre dois elementos Ligação química utilizando modelo de Bohr O tipo e quantidade de ligações dependem do átomo Ligação dupla entre átomos com mesma eletronegatividade e ligação simples para átomos com diferentes eletronegatividades Ligações covalentes possuem diferentes eletronegatividades Repulsão não tem relevância para ligação química Ligações são formadas para atingir o octeto Regra do octeto é usada para prever se a ligação será iônica ou covalente

Fonte: elaboração própria.

As concepções envolvendo os elétrons, como em “*Ligação como mistura de compartilhamento e transferência de elétrons*”, “*Ligação como atração entre elétrons [...]*” e “*Elétrons se movem entre os átomos [...]*” mostram uma concepção de ligação

em função apenas dos elétrons, envolvendo conceitos como “compartilhamento”, “transferência” e “ligações polares”.

Por último, nesse compromisso, as concepções, como em *“O tipo e quantidade de ligações dependem do átomo”* e *“Ligações são formadas para atingir o octeto”* apresentam ligação em função somente dos átomos que se ligam, como se essa fosse uma propriedade de cada um deles.

Além disso, podemos identificar uma mudança ontológica, pois a ligação em uma categoria de materialidade, ao entender a ligação enquanto um ente concreto, passa para uma categoria de abstração ao utilizar conceitos como compartilhamento, por exemplo.

De forma geral, as concepções alternativas, classificadas de acordo com uma visão de racionalismo clássico, apresentam ideias específicas para a ligação e que, ao estabelecer relações com outros conceitos, fazem-no de forma coerente com termos das próprias teorias, diferente do que foi apresentado no realismo.

O tema epistemológico de racionalismo moderno foi identificado a partir das contribuições da mecânica quântica na interpretação da ligação covalente, especificamente da Teoria da Ligação de Valência e os métodos que deram origem a ela. As concepções alternativas, apresentadas no Quadro 15, incluem conceitos que fizeram parte do desenvolvimento dessa Teoria e representam relações complexas com outros conceitos. Elas foram identificadas com base nos trabalhos de Salah e Dumon (2014; 2011), Bouayad *et al.* (2014) e Cil e Ugras (2015).

As primeiras concepções em destaque revelam alguns conceitos que não ficam evidentes em outras teorias, como considerar que a ligação não é apenas sobre o núcleo ou só sobre o elétron, mas sim um sistema com contribuições entre ambos. Isso mostra uma concepção de ligação diferente ao considerar que o fenômeno ocorre a partir de uma atração entre os elétrons, ditos compartilhados, e os núcleos atômicos. Além de considerar que não existe só atração durante a formação da ligação, mas também repulsão.

Quadro 15 - Concepções do tema epistemológico racionalismo moderno.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
RACIONALISMO MODERNO	Ligação é a atração entre os elétrons compartilhados e os núcleos Há repulsão entre átomos
	Ligações representadas como caixinhas Orbitais hibridizados são orbitais moleculares Orbital atômico é uma região no espaço com maior probabilidade de encontrar o elétron Orbital é uma superfície atribuída a uma probabilidade Orbital é a representação gráfica da função de onda Orbital atômico são funções complexas Ligação como sobreposição de orbitais atômicos A sobreposição lateral de orbitais é uma sobreposição de apenas meio orbital Orbitais atômicos estão relacionados apenas às ligações covalentes
	Hibridização é a reorganização de orbitais atômicos que resultam em uma nova configuração eletrônica que é mais adequada para a ligação Hibridização é a transição de elétrons para orbitais vazios na ligação Hibridização é o resultado observado da interação entre partículas Hibridização indica quantos elétrons de cada orbital participam da ligação Hibridização é um processo que acontece espontaneamente Orbital sp^3 é a combinação/junção/mistura/união/sobreposição de 1 orbital s e 3 orbitais p Hibridização são formas diferentes de orbitais

Fonte: elaboração própria.

Nas concepções envolvendo orbitais, como em “[...] *superfície atribuída a uma probabilidade*” e “*Ligação como sobreposição de orbitais*”, apresentamos as primeiras interpretações para além do compartilhamento de elétrons. Elas envolvem conceitos específicos das teorias do racionalismo moderno, como orbitais e sobreposição, e representam uma mudança em relação às visões anteriores. Relacionados, assim, com uma direcionalidade na ligação, porém, agora, a partir de sobreposição de orbitais. Além disso, a concepção de elétron também se modifica ao considerar sua natureza dual onda/partícula, em detrimento de uma concepção apenas como partícula.

Nas concepções envolvendo hibridização, como em “*Hibridização é a transição de elétrons [...]*” e “*Hibridização é um processo [...]*” destacamos a

hibridização como uma categoria ontológica de evento, que ocorre com as ligações a partir da ideia de orbitais. Não é exatamente um método matemático, como previsto, mas sim uma ação que pode ocorrer com os orbitais.

Quadro 16 - Concepções do tema epistemológico racionalismo contemporâneo.

Tema epistemológico	Concepções encontradas na literatura
RACIONALISMO CONTEMPORÂNEO	Orbital molecular é a combinação de orbitais atômicos Orbitais atômicos parecem com uma nuvem de formato específico A nuvem eletrônica mostra quão distante o elétron está do núcleo Orbitais atômicos e moleculares são níveis de energia Orbitais são locais vazios que podem ser preenchidos com elétrons Orbitais são a representação das entidades submicroscópicas TOM: menor ordem de ligação indica ligação curta

Fonte: elaboração própria.

O tema epistemológico do racionalismo contemporâneo foi identificado a partir das teorias do Orbital Molecular e do Funcional da Densidade, sendo atribuído a uma concepção de ligação a partir da deslocalização dos elétrons no sistema. As concepções incluem as ideias de “orbitais”, “nuvem eletrônica” e “ordem de ligação”. Elas foram identificadas com base nos trabalhos de Stefani e Tsapalis (2009) e Bouayad *et al.* (2014).

As concepções como “*Orbital molecular é a combinação de orbitais atômicos*” e “*Orbitais atômicos e moleculares são níveis de energia*” são referentes às ideias de ligação a partir da formação de orbitais e deslocalização dos elétrons pelo sistema. Essas se diferem do racionalismo moderno, pois não utiliza conceitos como sobreposição de orbitais e direcionalidade da ligação.

A concepção alternativa “*A nuvem eletrônica mostra quão distante o elétron está do núcleo*”, apresenta uma ideia do formato visual como resultado qualitativo, porém a interpretação daquela imagem fica por conta de uma natureza de partícula do elétron, e não a partir de uma densidade de carga, como é utilizado na teoria.

As concepções “*Orbitais são locais vazios [...]*” e “[...] *entidade submicroscópica*” são reflexo da materialização dos conceitos, a qual pode ocorrer a partir do contato com as representações gráficas possibilitadas pela teoria.

Embora a TOM fale sobre deslocalização de elétrons e orbitais moleculares, rompendo com o fenômeno individualizado e direcional de ligação, na última

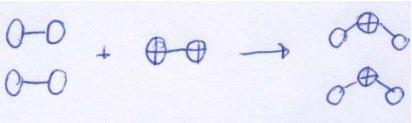
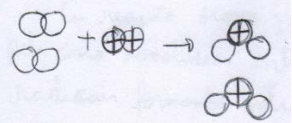
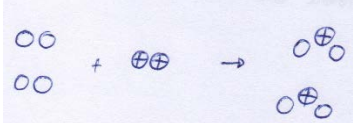
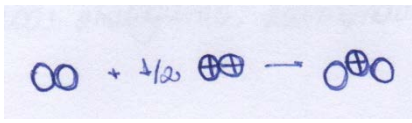
concepção, essas ideias reaparecem através da ordem de ligação, indo além de uma simples numeração da quantidade de ligações. Ela o associa ao tamanho da ligação, reforçando a relação desse cálculo, às ligações direcionais das outras teorias.

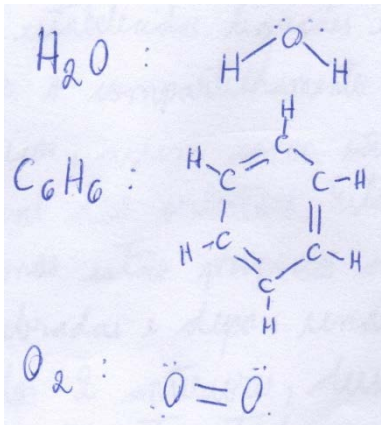
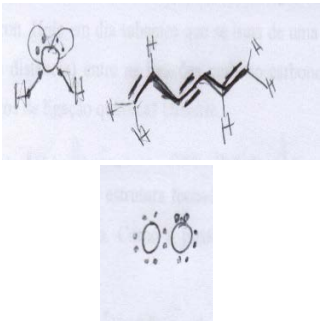
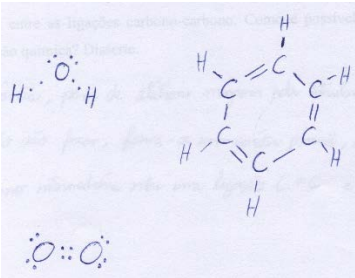
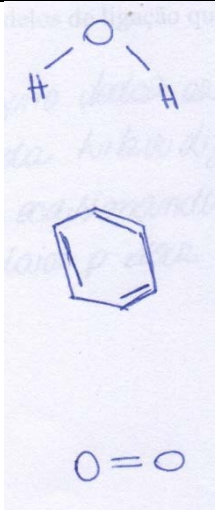
Para finalizar essa etapa, identificamos que a escolha de organizar as concepções identificadas a partir dos significados dos temas epistemológicos da revisão narrativa se apresentou como uma opção bastante adequada. Isso, pois a verbalização, ou seja, o uso de termos específicos de uma teoria ou outra é comum na formação da concepção alternativa. Assim sendo, não é porque uma concepção utiliza o termo compartilhamento, que necessariamente esteja relacionado com o significado identificado no tema epistemológico que a utiliza. Por outro lado, da forma como foi apresentado, a concepção reflete o significado do tema epistemológico, mesmo usando palavras de outros temas. Além disso, a utilização da revisão sistemática se mostrou uma forma diferente de obter os dados referentes ao domínio da ontogênese e ainda possui o potencial de explorar informações que não interessaram para nós, especificamente, nesse momento. Na sequência apresentamos os dados referentes à aplicação do questionário.

4.2.2 Questionário

O Quadro 10 apresenta as respostas, transcritas literalmente, dos alunos ao questionário. Algumas questões envolvem o desenho de figuras e as que foram deixadas em branco pelos respondentes estão marcadas com um hífen ("-"). Em seguida, analisamos as respostas buscando responder à questão de pesquisa da seção. A estrutura da análise está composta em, primeiramente, o que era esperado como resposta para a questão, o que obtivemos em geral nas respostas e alguns casos específicos. Também buscamos estabelecer um paralelo com as revisões (narrativa e sistemática) de forma a reconhecer quais concepções os alunos, em um processo de responder a um questionário, apresentam sobre temas relacionados com ligação covalente.

Quadro 17 - Respostas dos alunos participantes ao questionário.

Aluno	A1	A2	A3	A4
Questão 1	"É uma interação entre 2 ou mais elementos de tal forma que após esta interação eles se encontrem mais estáveis do que estavam antes"	"Interação entre átomos por meio de sobreposição de orbitais"	"Interação eletrostática entre os constituintes de pelo menos dois átomos"	"Ligações químicas são "junções" entre dois átomos com a finalidade de formar uma nova molécula"
Questão 2	"É o compartilhamento de elétrons entre átomos"	"Ligação que ocorre por meio de sobreposição de orbitais atômicos, sem polarização de densidade eletrônica"	-	"Uma ligação covalente é a junção de dois metais ou ametais através do compartilhamento de elétrons"
Questão 3				
Questão 4	"Esta reação ocorre pois foi fornecido energia em forma de radiação"	"A reação ocorre, pois ao fornecer radiação há a formação de radicais pela cisão homolítica entre Cl-Cl e C-H e ocorre recombinação dos radicais formando outro produto"	"Reação fotoquímica, rompimento da ligação Cl-Cl (clivagem homolítica), Cl livre tende a doar seus elétrons à espécie menos eletronegativa"	"Essa reação ocorre pois há uma protonação do H ⁺ pelo Cl ⁻ , sendo assim há a formação de um carbocation que ataca o halogênio, formando a substituição"
Questão 5	"A presença de pelo menos um metal, ametal, ou semi-metal"	"Número de elétrons na camada de valência"	"Grupo A: mesmo período na tabela periódica; Grupo B: doam ou recebem 1 e ⁻ de valência; Grupo C: podem ser trivalentes, realizando três ligações; Grupo D: tetravalentes, quatro ligações"	"Todos possuem eletronegatividade alta ou intermediária"

Aluno	A1	A2	A3	A4
Questão 6	 Hand-drawn chemical structures for Questão 6, A1: H_2O, C_6H_6, and O_2.	 Hand-drawn chemical structures for Questão 6, A2: Ethane, Ethene, and Ethyne.	 Hand-drawn chemical structures for Questão 6, A3: Hydrogen peroxide, Benzene, and Dioxygen.	 Hand-drawn chemical structures for Questão 6, A4: Water, Benzene, and Dioxygen.
Questão 7	"São estabelecidas ligações entre cada átomo de carbono do tipo σ, na qual ocorre o compartilhamento de elétrons pela sobreposição frontal de orbitais atômicos, assim como são formadas ligações π a partir da sobreposição lateral dos orbital. Estando em uma forma cíclica os orbitais dos carbonos estão propícios a formar ligações π entre si, sendo formadas e quebradas e depois sendo refeita entre 2 outros átomos de carbono diferentes dos 2 anteriores, dessa forma, por contar com a contribuição de ligações π entre todos os carbonos não se tem distinção energética entre as ligações"	"Explica-se esse fenômeno por meio da ressonância de elétrons, pela teoria do orbital molecular, os orbitais p se combinam na molécula de benzeno formando uma nuvem π, na qual os elétrons podem se deslocar, de tal forma que não haja somente ligações simples ou duplas, mas sim interações entre orbitais p de mesma energia para os 6 carbonos."	"Efeito da ressonância, pares de elétrons migram pela estrutura rapidamente. Duplas ligações não são fixas, forma-se um caráter parcial, sendo a distância das ligações do benzeno intermediária entre uma ligação $C=C$ e $C-C$."	"No Benzeno todas as ligações apresentam mesmo comprimento por conta da hibridização dos carbonos sp^2, ligados por duplas conjugadas, ocasionando uma estabilização por ressonância, uma vez que os orbitais p dos carbonos são usados para estabilização"

Aluno	A1	A2	A3	A4
Questão 8	"Apesar de ser estabelecida ligações covalentes entre os dois oxigênios cada um ainda conta com elétrons que não participam dessas ligações e que podem ser atraídos pelo campo magnético aplicado sobre eles"	"Pelo diagrama da teoria do orbital molecular, na molécula de O ₂ há elétrons desemparelhados em orbitais π^* , o que leva a um comportamento paramagnético"	"Esse aspecto é explicado por meio da TOM. Ligação dupla do O ₂ deixa a molécula com elétrons desemparelhados, segundo a regra de Hund. Faz com que o spin eletrônico não se anulem"	-
Questão 9	"O oxigênio é um elemento que possui alta eletronegatividade, ou seja, quando ele estabelece ligações covalentes ele tende a fazer com que os elétrons utilizados para a formação da ligação fiquem mais próximos dele, assim são variados momentos de dipolo onde há a presença de cargas parciais na molécula, deixando-a polar"	"Devido a repulsão entre os pares de elétrons não ligantes do oxigênio há uma aproximação entre os Hs, assim a molécula possui geometria angular e os dipolos das ligações O-H não se anulam, tendo um momento de dipolo resultante"	"Oxigênio ~~de~~ compartilha dois de seus elétrons nas ligações covalentes com os hidrogênios. Pares de elétrons não ligantes geram repulsão aos pares de elétrons das ligações, até que alcancem uma posição de equilíbrio"	"Como o oxigênio é muito eletronegativo em comparação ao hidrogênio o mesmo acaba por criar uma maior densidade eletrônica em si, deixando os H ⁺ mais eletropositivos. Logo há a formação de dipolos δ^+ e δ^- ."
Questão 10	"Teoria de Lewis"	"Teoria do orbital molecular, repulsão dos elétrons de valência, fórmula de Lewis, distribuição dos elétrons de valência de Linus Pauling."	"Modelo de Lewis, teoria do orbital molecular, teoria da ligação de valência, regra do octeto, modelo estrutural."	"Teoria da Ligação de Valência Teoria do Orbital Molecular Teoria do Efeito Indutivo Teoria da Estabilização por Ressonância"

Fonte: elaboração própria.

Na questão 1, buscamos identificar como os alunos respondem a uma pergunta bastante ampla, podendo apresentar uma teoria específica ou de forma generalizada. Com os nossos resultados da revisão narrativa, foi possível verificar se o aluno, caso optasse por alguma teoria ou modelo específico, mantinha-se coerente com os conceitos apresentados.

Os alunos utilizaram palavras como “interação” ou “junção” para definir ligação química, enquanto recorriam a algum conceito específico: sobreposição de orbitais, atração eletrostática e estabilidade. Com exceção da “[...] *sobreposição de orbitais*”, as respostas refletem uma concepção realista de ligação, pois, utilizando um termo comum, os alunos explicam a ligação através de um fenômeno que simplesmente acontece, sem muito mais detalhes. Esse tipo de resposta está acompanhado de um obstáculo verbalista, pois o aluno utiliza um termo como se seu entendimento fosse automático. Embora a questão fosse bastante ampla, as respostas poderiam conter aspectos além de um simples realismo, para o qual atribuímos um período que pouco se sabia ou se refletia sobre a ligação química.

A resposta que considera a sobreposição de orbitais pode ser atribuída a uma concepção de racionalismo moderno, ao explicar a que tipo de interação estava se referindo. No entanto, ao optar por uma teoria específica, acabou deixando de lado todas as outras naturezas de ligação química. Ainda em relação às concepções encontradas na literatura, as respostas reforçam as ideias de conectividade e de capacidade do átomo, como em “[...] *‘junções’ entre dois átomos [...]*” e “[...] *eles [os átomos] se encontrem mais estáveis do que estavam antes*”.

Na questão 2, embora mais específica que a anterior por restringir à definição de ligação covalente, ainda é bastante ampla considerando que o aluno poderia partir de mais de um modelo ou teoria. Nesse caso, podemos avaliar tanto a coerência na resposta (se as relações entre os conceitos estão feitas de acordo com a teoria escolhida) quanto a pertinência da escolha (o que levou a defender uma teoria específica). Os alunos mantiveram apenas a concepção de compartilhamento ou sobreposição de orbitais para a ligação covalente, nada sobre transferência de elétrons ou cargas. Um dos alunos diferencia da resposta anterior apenas escrevendo que, na ligação covalente, não há “polarização da densidade eletrônica”, como se todas as ligações covalentes fossem compartilhamentos equidistantes de elétrons. O termo “sobreposição” apareceu novamente, como esperado a partir da resposta anterior, que considerava apenas um perfil de ligação. Além disso, essa

resposta reforça a concepção de ligação covalente como o único tipo possível de ligação, enquanto atribui a ela um significado de acordo com o racionalismo moderno. É como uma mudança epistemologicamente diferente, mas que mantém a categoria ontológica. Identificamos ainda uma concepção realista ao atribuir a ligação como propriedade dos metais ou ametais de se ligarem, como em “[...] *junção de dois metais ou ametais [...]*”.

Na questão 3, os alunos eram levados a utilizar outros tipos de representações para alguns elementos e, embora sejam símbolos já utilizados pela química, não são comuns atualmente. Além disso, foi possível analisar se, a partir do conhecimento que possuíam, eles misturariam indiscriminadamente os modelos e teorias. O objetivo era provocar uma concepção de ligação como conectividade, numa visão realista, sem se preocupar com especificidades. Nas respostas, apenas um aluno representou as ligações por traços, porém não diferenciou a ligação nas moléculas de hidrogênio e oxigênio. Enquanto os demais representaram as moléculas considerando apenas algum tipo de aproximação entre os átomos e que não possui qualquer detalhe sobre como ou por que a ligação ocorre. Dessa forma, podemos associar a todas as respostas um realismo na concepção de ligação covalente. Por outro lado, uma constatação interessante é que todas as respostas consideram a geometria angular na molécula de H_2O , mesmo sem qualquer informação no questionário que apresente isso. É uma constatação ontológica de abstração que mostra a relação do aluno com um conceito que, mesmo em uma concepção simplista de ligação e molécula (se compararmos o realismo com racionalismo clássico), precisa ser mantida: H_2O é uma molécula angular.

Na questão 4, buscamos estabelecer um paralelo com as teorias dos Radicais e dos Tipos, no que se refere, principalmente, à força de combinação. Embora esses conceitos não sejam comuns no ensino de ligação química, como vimos, é possível associar a uma concepção de ligação dependente dos átomos que se ligam (uma propriedade) e que variam em sua força. Nesse sentido, nenhuma resposta atribuiu a ocorrência da reação a um parâmetro que envolvesse a formação de ligações mais fortes durante o processo. Por outro lado, duas respostas citaram que ocorre uma cisão homolítica e uma citou a formação de radicais, como em “[...] *ocorre recombinação dos radicais [...]*”, que está de acordo com a teoria base da questão. Podemos associar às respostas uma concepção do racionalismo clássico, ao citar quebras de ligações envolvendo compartilhamento de pares de elétrons,

como em “[...] *cisão homolítica entre Cl-Cl e C-H [...]*”. Além disso, podemos identificar uma justificativa energética (a reação ocorre porque tem energia para isso) e uma que atribui características animistas à partícula (ocorre porque o carbocátion ataca). Essa última apresenta características de uma concepção relacionada à categoria ontológica de matéria.

Na questão 5, elaboramos uma pergunta relacionada à valência como uma capacidade do átomo com o intuito de levantar possíveis concepções empiristas. Alguns alunos citam a valência, utilizando até termos como “trivalentes” ou “tetravalentes”, para se referir às características comuns aos átomos de um mesmo grupo. As respostas também refletem a concepção que a ligação é uma capacidade que os elementos possuem e que é possível prever a quantidade de ligações que cada um pode realizar. Outras respostas incluem uma forma de dizer que nos grupos podem aparecer qualquer elemento, ou seja, não há nada em comum, e a relação com a eletronegatividade. É possível identificar, primeiramente, uma mistura nos conceitos de valência que, ora aparece como uma camada no modelo atômico, ora como quantidade de ligações em potencial, por exemplo: “[...] *camada de valência*” e “[...] *tetravalentes, quatro ligações*”. Embora ambas as respostas apresentem uma concepção parecida com a que chamamos de empirista, por estar relacionada com uma medida de peso atômico, nenhuma delas é obtida, nesse caso, com um instrumento. Na realidade, elas exigem a abstração presente no racionalismo clássico, ao utilizar modelos atômicos para prever certos comportamentos.

Na questão 6, os alunos deveriam desenhar três moléculas diferentes e que se relacionavam com as próximas três questões. O objetivo era causar um conflito entre uma primeira representação, possivelmente de Lewis, e a questão sobre alguma propriedade que necessita de outra teoria ou modelo para ser explicada. Na molécula de C_6H_6 não explicitamos que era necessariamente o benzeno, embora, durante a produção do questionário, era a essa molécula que nos referíamos. De modo geral, as representações ficaram bastante parecidas. Na molécula da água, algumas pequenas variações entre elas, como desenhar ou não uma linha representando a ligação, ou então desenhar o orbital dos elétrons não ligantes. Porém, em todas é possível identificar que o aluno considerou a repulsão entre os pares de elétrons, atribuindo uma geometria angular à molécula. Na molécula de oxigênio, duas respostas utilizaram linhas e duas desenharam apenas os pontos

representando os elétrons ao redor da molécula. Como não foi pedido nenhum modelo específico, era de se esperar que o aluno utilizasse o que achasse melhor. Por outro lado, algumas representações não contêm todos os elétrons envolvidos na molécula, o que representa uma desconexão com o modelo adotado. Com exceção de uma proposta de molécula aberta de C_6H_6 , todos alunos representaram a molécula de benzeno com ligações duplas e simples alternadas. Embora seja o suficiente em relação à quantidade de ligações realizadas por cada átomo, essa representação não leva em consideração que dados experimentais que apontam para o fato de todas as ligações do benzeno serem iguais em tamanho e energia. Esse conflito, entre representação e dados empíricos, foi levantado na próxima questão. Podemos associar todas as respostas a uma concepção do racionalismo clássico, por utilizar de representações que consideram a ligação como compartilhamento de par de elétrons e até mesmo a repulsão entre pares eletrônicos, como na molécula de água. Os erros indicam uma falha na assimilação do modelo e não apresenta, necessariamente, uma visão epistemológica diferente, nesse caso.

Na questão 7, os alunos deveriam avaliar a informação de que, a partir de dados empíricos, a molécula de benzeno possui ligações iguais (em tamanho e energia) entre os carbonos e isso nem sempre está de acordo com as formas de representação. Todas respostas indicam algum tipo de movimento que há nos elétrons das ligações, fazendo com que as ligações sejam todas iguais, ou então que as ligações duplas se quebram e se formam a todo momento. Identificamos algumas misturas de conceitos, ou incoerências, como a explicação de que todas as ligações são iguais, pois existem duplas conjugadas. Além disso, há atribuições de propriedades aos elétrons como “nuvem pi” ou tipificação da ligação como sendo π (pi) ou σ (sigma).

Os alunos também recorrem a ferramentas como hibridização e à Teoria do Orbital Molecular, embora, de fato, não a utilize para justificar a afirmação. Em relação à resposta anterior, verificamos um movimento para utilizar uma teoria diferente e que se aproxima de um racionalismo moderno, como em “[...] ligações [...] do tipo σ , na qual ocorre o compartilhamento de elétrons pela sobreposição frontal de orbitais atômicos”. Porém, na sequência da mesma resposta identificamos uma concepção que mantém características de um racionalismo clássico, como a ligação sendo formada apenas entre dois átomos: “[...] sendo formadas e quebradas

e depois sendo refeita entre 2 outros átomos de carbono”. A formação da concepção alternativa fica evidente nessa resposta, quando, ao estabelecer uma relação com um conceito novo, o aluno mantém concepções relacionadas à outra teoria. Esses casos aparecem em todas as respostas, como em *“Explica-se esse fenômeno por meio da ressonância de elétrons, pela teoria do orbital molecular [...]”,* porém a Teoria do Orbital Molecular não utiliza ressonância, *“[...] elétrons migram pela estrutura rapidamente. [...]”,* enquanto ressonância é uma forma de explicar um estado intermediário, e *“[...] as ligações apresentam mesmo comprimento por conta da hibridização dos carbonos sp^2 , ligados por duplas conjugadas [...]”,* mas duplas conjugadas são ligações duplas alternadas com ligações simples, logo não têm o mesmo comprimento. Para todos os alunos participantes, nessa questão, verificamos uma dificuldade maior quando precisaram se deslocar de uma concepção do racionalismo clássico para um racionalismo moderno.

Na questão 8, buscamos avaliar a transição de uma representação mais simples (da questão 6) para uma explicação mais complexa utilizando, especificamente a TOM. Embora a TLV também possa ser utilizada para explicar este comportamento, por não ser uma discussão tão comum, não esperávamos qualquer resposta envolvendo a Teoria. Apenas dois alunos responderam que o comportamento paramagnético da molécula de oxigênio pode ser explicado pela Teoria do Orbital Molecular. Como é um fenômeno bastante comum na introdução à Teoria, era de se esperar que mais respostas chegassem a essa conclusão.

Apesar de apontarem para a utilização de uma teoria específica, não foi feito nenhum comentário em relação às representações da questão 6, nem sobre o uso de mais de uma teoria ou modelo. Além disso, uma das respostas ficou em branco e a outra defendeu que tal comportamento deveria ocorrer por causa dos elétrons que não participam da ligação, mantendo uma concepção relacionada ao racionalismo clássico. Uma das respostas envolvendo a TOM fez bom uso da teoria utilizando conceito de *“[...] elétrons desemparelhados em orbitais π^* [...]”,* conforme esperado. No entanto, a outra resposta, mesmo utilizando a TOM, responde que *“[...] Ligação dupla do O_2 deixa a molécula com elétrons desemparelhados [...]”,* mostrando que a categoria ontológica de ligação como sendo simples ou dupla, que aparece no racionalismo clássico, mantém-se.

Na questão 9, os alunos deveriam explicar o formato angular da molécula H_2O que poderia estar em desacordo com a representação na questão 6. Embora

todos tenham considerado a geometria quando não foi solicitada (questão 3), na hora de justificar o comportamento, nem todas as respostas estavam coerentes com o modelo esperado. Apenas duas respostas citam a repulsão entre os elétrons como a causa da angulação. Entretanto, segundo os alunos, ou a repulsão ocorre apenas entre os pares não ligantes, ou ocorre apenas entre o par não ligante e a ligação covalente, da mesma forma que foi identificada na revisão sistemática. Nenhum deles cita a repulsão entre todos os pares de elétrons. As outras respostas justificam o fenômeno com base na eletronegatividade do oxigênio e na presença de cargas parciais para explicar tal geometria. Identificamos, nas respostas, características do realismo, ao colocar a ligação como capacidade do átomo, além de apresentar um obstáculo animista, como em “[...] quando ele [oxigênio] estabelece ligações covalentes [...]” e “Oxigênio compartilha dois de seus elétrons”.

Na questão 10, queríamos avaliar se os alunos eram capazes de identificar que, no decorrer do questionário, eles utilizavam mais de um modelo ou teoria e apresentar exatamente a qual delas eles se referiam. Nas respostas, os alunos simplesmente listaram alguns conceitos, modelos, teorias, mesmo sem ter utilizado, necessariamente, qualquer um deles durante a resolução do questionário. Um dos alunos colocou apenas “Teoria de Lewis”, enquanto outros escreveram “Teoria do Orbital Molecular” sem mesmo terem a utilizado em qualquer resposta. Houve ainda a “Teoria do Efeito Indutivo” ou “Estabilização por ressonância”. Em suma, as respostas mostraram uma grande dificuldade por parte dos alunos em reconhecer e estabelecer uma relação entre as justificativas e em quais teorias ou modelos estavam, de fato, se baseando.

4.2.3 A ligação entre os domínios da ontogênese e microgênese

No início desta seção, destacamos a questão de pesquisa que norteou a análise dos resultados da revisão sistemática e do questionário. As duas fontes de dados permitiram levantar as concepções, nos domínios ontogenético e microgenético, acerca do conceito de ligação covalente e todos os outros conceitos relacionados diretamente a ela.

A nossa interpretação dos dados da revisão sistemática, organizados de acordo com a revisão narrativa, mostrou que, no processo de relação com o conceito, as visões identificadas durante o percurso histórico podem se apresentar de diversas maneiras. Por exemplo, nas concepções categorizadas como realismo,

que refletem as visões de ligação como algo que é propriedade do que está se ligando, uma força que mantém os átomos unidos, uma tipificação de um conceito mais geral, a sua materialização em algo próximo ao macroscópico, um sistema isolado ou ainda inexistente. Todas elas têm em comum uma visão realista por não apresentarem uma definição objetiva de ligação covalente, sem utilizar de artifícios como comparar com outros conceitos que não necessariamente mantém relação entre si. Essa análise também permitiu identificar que as visões apresentadas a partir da revisão narrativa se repetiram claramente nas concepções dos alunos e, embora tenham surgido em contextos e teorias específicas, essas visões não se prendem a um único contexto ou teoria. Como, por exemplo, nas concepções classificadas pelo tema epistemológico animista que não há nenhuma referência à Afinidade. Pelo contrário, utilizam conceitos como átomo, estabilidade, octeto *etc.* Isso mostra que as categorias refletem, na verdade, uma relação dos conceitos com o indivíduo e que não depende, estritamente, da relação epistemológica.

As categorias identificadas na revisão sistemática permitiram que estabelecêssemos um paralelo com as respostas do questionário. Este deve ser utilizado para identificar as concepções que surgem em um microprocesso. No entanto, na nossa pesquisa em específico, não encontramos nenhuma categoria que se diferenciasse das demais já apresentadas. Isso pode estar relacionado com duas coisas importantes. O número baixo de sujeitos que apresentaram disponibilidade para responder à pesquisa e a incessante revisão sistemática que, por sua vez, é feita também com a aplicação de questionários, sobretudo estudantes, na maioria dos trabalhos.

4.4 Matriz semântica

Quais compromissos epistemológicos e ontológicos podem ser identificados a partir da revisão narrativa da história, da revisão sistemática sobre concepções do conceito de ligação covalente e de um questionário aplicado a alunos do ensino superior?

Após discutir nossas três grandes fontes de dados, a revisão narrativa com o domínio genético sociocultural, a revisão sistemática com o domínio ontogenético e

o questionário com o domínio microgenético, produzimos a matriz semântica de significação do conceito de ligação covalente. Como explanado, a matriz semântica representa uma metodologia de acordo com o programa de pesquisas do perfil conceitual e é uma etapa na qual é possível identificar todas as combinações de significados com compromissos epistemológicos e ontológicos. A matriz, apresentada no Quadro 18, está dividida nas colunas *tema epistemológico*, identificado a partir da revisão narrativa, *categoria*, representando uma visão ontológica dentro do tema epistemológico, e os *compromissos epistemológicos e ontológicos*, em que explicamos que foi possível identificar.

Quadro 18 - 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.
Empirismo	Inexistência	A ligação covalente está ausente. Não há qualquer preocupação em pensar sobre a conectividade entre átomos, substâncias <i>etc.</i>
	Energética	A ligação covalente é uma forma de armazenamento de energia e pode tanto absorver, quanto liberar energia.
Essencialismo	Valência	A ligação covalente é uma propriedade obtida empiricamente, através da valência e corresponde a um número.
	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.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
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.
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 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	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: elaboração própria.

Os temas epistemológicos apresentados são: animista, realismo, empirismo, essencialismo, racionalismo clássico, racionalidade moderna e racionalidade contemporânea. A partir desses temas, identificamos as categorias que mantiveram um tema epistemológico em comum.

O primeiro tema epistemológico foi identificado a partir das ideias de Afinidade. Nos trabalhos que buscaram analisar esse período, a chamada literatura secundária, a atribuição de características humanas a esses fenômenos já era chamada de *antropomorfismo*. Ao confrontarmos com dados da revisão sistemática e questionário, concluímos que esse tipo de raciocínio não foi exclusivo da Afinidade, mas sim pode ocorrer com vários outros modelos e teorias. É uma atribuição que já foi identificada nos trabalhos de história, reportada como um obstáculo no estabelecimento de relação com o conceito, logo não poderia deixar de aparecer quando se tratou de ligação covalente.

O segundo tema epistemológico foi elaborado a partir das teorias que não tinham como foco a ligação química, muito menos usava o termo covalente, mas ainda sim tiveram um papel importante na história do seu desenvolvimento. Logo, todas as categorias mantêm em comum a ausência de uma definição objetiva de ligação covalente, sua falta de definição na relação com outros conceitos e até mesmo a presença de sistemas que deixam a ligação totalmente de fora.

Chamamos a segunda categoria de *dependência incoerente*, pois a significação tem uma dependência de chamar a outro conceito. Ela surgiu das concepções alternativas que atribuíram ligação covalente a um fenômeno que ocorre entre ametais ou metais, por exemplo. Isso mostra, primeiramente, uma visão realista ao não fornecer informações acerca do que é, exatamente, a ligação covalente e é incoerente, pois não há nenhuma relação direta entre ametais e metais enquanto uma classificação da tabela periódica. Assim como não é possível estabelecer uma relação com os íons, enquanto um sistema eletricamente carregado, com a ligação covalente. Falta informação para que seja possível estabelecer qualquer uma dessas relações.

A terceira categoria reuniu as concepções que simplesmente atribuíram o termo *força* à ligação covalente. Ela é uma significação realista, pois não apresenta qualquer informação sobre o conceito de força e acaba utilizando de uma verbalização ao esperar que, utilizando um termo que está presente nas ciências, sua definição seja entendida automaticamente.

A *tipificação* é bastante semelhante à categoria de *força* ao esperar que, utilizando de palavras certas, o conceito seja automaticamente entendido. Porém, ao dizer que uma ligação x é um tipo de ligação y de nada acrescenta à sua descrição e explanação.

A *materialidade realista*, embora faça mais à descrição de ligação do que as categorias anteriores, ainda reflete uma ideia de atribuir uma concretização a um ente abstrato para que seja possível estabelecer algum tipo de relação com o cotidiano. Por esse motivo, a relação com o senso comum e cotidiano, foi chamado de realista.

As duas últimas categorias refletem uma ideia um pouco diferente das anteriores, principalmente por não se preocuparem exatamente com uma definição. Mas, ainda assim, refletem situações em que a ligação passa a ter um significado diferente dos demais e, por esse motivo, foram incluídas na matriz semântica. A

categoria de *isolamento* está associada a uma significação que é concebida ao limitar a ligação química, especificamente a ligação covalente, a um sistema isolado composto, na grande maioria das vezes, de apenas dois átomos.

A categoria de inexistência deve contemplar aquelas concepções que, ao analisar o sistema, seja em uma reação química, ou na proposição das moléculas, exclui por completo qualquer reflexão sobre a conectividade daquelas partículas. E assim o faz, necessariamente, para a ligação covalente.

O terceiro tema epistemológico, empirismo, foi elaborado a partir das reflexões que associavam a ligação covalente a algum tipo de medida experimental. Identificamos a partir da revisão sistemática e, corroborado pelo questionário, duas concepções diferentes. Uma delas, que chamamos de *energética*, contempla as visões que associa um valor à ligação covalente, obtido a partir de medidas que medem a quantidade de energia necessária para romper a ligação, associando a ela uma forma de armazenamento dessa mesma quantidade de energia. A categoria valência corresponde à atribuição de um número aos elementos que podem ser obtidos experimentalmente a partir dos cálculos envolvendo peso atômico.

O tema essencialismo foi identificado como a categoria de *par de elétrons* por limitar a definição a uma propriedade essencial da ligação covalente, a de possuir dois elétrons. Embora esse significado tenha surgido durante os primeiros trabalhos do século XX, ele se estendeu, principalmente na relação com o sujeito, de forma a atribuir para as outras teorias que ainda se desenvolveriam.

O tema de racionalismo clássico apresenta as primeiras tentativas de definir a ligação através de um conceito feitas pela comunidade científica. A categoria de *identidade* foi identificada a partir das concepções que entendiam a ligação covalente como a única conexão possível entre átomos. Mesmo para as ligações iônicas e metálicas, quando os átomos se ligam, esses o fazem de forma covalente.

A categoria *propriedade do elétron* mostra a ligação covalente como sendo uma característica natural do elétron de se ligar. O processo todo ocorre, pois, ao ter atração com o núcleo positivo os átomos acabam ligados, mas ainda assim porque isso é uma capacidade que os elétrons têm.

A categoria *propriedade do átomo* transfere essa mesma propriedade de estabelecer uma ligação para o átomo. Este ainda tem a capacidade de influenciar nas propriedades da ligação, como repulsão, polaridade, formato *etc.*

O tema racionalismo moderno foi identificado a partir do uso da mecânica quântica aplicada aos sistemas moleculares. A categoria de *sistema complexo* descreve a significação da ligação enquanto um processo que envolve não apenas atração, mas também repulsão e, além disso, é entendido como a estabilidade associada à atração entre elétrons e núcleos participantes. Não apenas aos elétrons, ou aos átomos, como foi possível identificar nas anteriores.

A categoria *orbitais localizados* contempla as concepções de ligação que representam uma grande mudança devido à natureza dual do elétron. O qual passa de uma partícula para um comportamento de onda, constituindo uma ligação com a sobreposição dos orbitais atômicos, de forma direcional.

A categoria *processo* entende a ligação covalente a partir de um processo de hibridização que ocorre em etapas como promoção do elétron para maiores níveis de energia e a formação de novos orbitais, os quais explicam o sistema de uma forma mais satisfatória

O último tema epistemológico foi identificado a partir das teorias que se desprendem da ligação enquanto um fenômeno que ocorre localmente, abrangendo os orbitais moleculares e o funcional da densidade eletrônica. A categoria de *deslocalizados* também entende a ligação a partir da formação de orbitais, fundamentado na natureza dual do elétron, mas se difere das anteriores por significar como um fenômeno que não acontece de forma local, mas sim engloba todo o sistema molecular.

A *materialidade ilustrativa* inclui as ideias de materialização do conceito, mas, ao contrário da outra categoria, o faz com base em modelos e teorias e não na realidade próxima. Embora esteja situada no racionalismo contemporâneo, pode ser facilmente entendida como uma categoria do racionalismo moderno, sem qualquer modificação, se não a das próprias ilustrações gráficas.

A categoria *ordem de ligação* representa uma significação de ligação covalente a partir de um cálculo que envolve a análise da estrutura eletrônica do sistema, em diagramas de energia de orbitais ligantes e antiligantes. A categoria ainda reflete uma tentativa de estabelecer um paralelo com as teorias que entendiam a ligação como algo direcional.

A produção da matriz semântica se mostrou uma etapa extremamente importante para a proposição das zonas do perfil conceitual, pois contribuiu de forma a mostrar, esquematicamente, como o conceito de ligação covalente é diverso em

sua significação, além de permitir identificar grandes categorias. Essas categorias foram transformadas nas zonas, permitindo destacar semelhanças e diferenças entre as visões sobre o conceito.

4.5 Proposta de perfil conceitual de ligação covalente

O que contempla cada zona do perfil conceitual para o conceito de ligação covalente?

A produção da matriz semântica permitiu que identificássemos diversas particularidades no processo histórico de significação do conceito de ligação covalente. Para propor as zonas do perfil conceitual, foi necessário identificar grandes categorias que expressassem os diferentes compromissos epistemológicos e ontológicos. Como apresentado anteriormente, após a produção da matriz semântica, identificamos o que, segundo os resultados desta pesquisa, deve contemplar cada zona do perfil conceitual. Para isso, unimos as categorias a partir do que é possível identificar como comum entre elas. No Quadro 19, apresentamos as categorias que fazem parte da primeira zona do perfil conceitual.

Quadro 19 - Caracterização da primeira zona.

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 pensar sobre a conectividade entre átomos, substâncias <i>etc.</i>
	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: elaboração própria.

Todas essas categorias identificadas estão relacionadas a uma zona do perfil conceitual que pouco ou nada diz sobre o próprio conceito de ligação covalente. As tentativas de significar a ligação ficam limitadas a associá-las a outros conceitos sem que essa associação resulte em algo produtivo. Esse processo de significação indiscriminado reflete a ausência de uma natureza etiológica e busca, na verbalização do conceito, um entendimento automático sem que o próprio sujeito tenha conhecimento a que está se referindo. Tendo isso em vista, essa zona foi chamada de *conectividade indiscriminada*.

Quadro 20 - Caracterização da segunda zona.

Tema epistemológico	Categoria	Compromissos epistemológicos e ontológicos
Realismo	Força	A ligação covalente é uma força (indefinida) que une átomos, substâncias, íons etc.
	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: elaboração própria.

No Quadro 20, podemos identificar os significados relacionados a uma concepção de ligação covalente que ocorre exclusivamente pela atração entre as partes. Essa zona se difere da anterior por apresentar significados que buscam definir em específico a natureza da própria ligação, não algo paralelo. Nas diferentes categorias dessa zona podemos identificar várias tentativas de associar a ligação a algum tipo de atração, como uma força, uma propriedade natural do elétron ou do átomo e a visualização da ligação enquanto um ente concreto, presente na molécula para unir as partículas. A zona ainda reflete uma situação inicial na análise da ligação em que se prende à visão do processo ocorrendo para uma única e isolada molécula. Ressaltamos que isso não significa que, inicialmente, isso não possa ser feito, mas sim que o problema é se estagnar nessa visão. A segunda zona foi chamada de *atividade estabilizadora* por representar uma concepção de que a ligação covalente, estabelecida pelo compartilhamento de um par de elétrons, por

exemplo, possui uma natureza exclusivamente atrativa e que contribui positivamente para a estabilização do sistema.

Quadro 21 - Caracterização da terceira zona.

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 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: elaboração própria.

No Quadro 21, apresentamos os significados que deram origem à terceira zona do perfil conceitual. Podemos identificar na primeira categoria, *sistema complexo*, a principal característica dessa zona. Ela define a ligação covalente como um processo que ocorre a partir do equilíbrio entre atração e repulsão, assim como estabilização e desestabilização. Assim, acaba se diferenciando da zona anterior relacionada apenas a uma visão de atração e estabilidade. Essa característica é seguida da visão de um sistema que considera ligações localizadas e direcionais. Mesmo nas teorias envolvendo orbitais, a partir da natureza dualística do elétron, a sobreposição, logo formação da ligação covalente, é um fenômeno que ocorre em uma orientação específica. Destacamos como isso acaba influenciando outras teorias que partem de fundamentos diferentes, pois como discutimos nas seções anteriores, podemos entender a ordem de ligação, presente na Teoria do Orbital Molecular, como uma forma de não se desprender das ligações individualizadas. Essa zona foi chamada de *remanescência localizada* por incluir as primeiras considerações de desestabilização e por refletir uma concepção localizada e direcional de ligação. A ideia de remanescência é exatamente considerar o resultado entre todas as forças (atração e repulsão) na formação da ligação ou da molécula como todo.

Quadro 22 - Caracterização da quarta zona.

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 ilustrativa	A ligação covalente, a partir do orbital deslocalizado, é uma forma idêntica à sua representação gráfica.

Fonte: elaboração própria.

O Quadro 22 apresenta os significados que deram origem à quarta zona do perfil conceitual. Podemos identificar duas categorias, apresentadas a partir do racionalismo contemporâneo, que ilustram a ideia de uma zona que se diferencia das demais. Nesses significados, destacamos um conceito de ligação covalente que se desprende de uma natureza localizada e direcional, isso ocorre a partir das teorias que buscaram analisar o sistema em sua estrutura eletrônica geral, não apenas a ligação, isoladamente. O resultado disso, como conhecemos, é a formação de orbitais deslocalizados pela molécula e sua identificação como sendo a unidade. Destacamos também que, mesmo uma concepção aparentemente simplista de materialidade, pode ser entendida em uma visão dessa zona, pois a ilustração é acompanhada da visão de orbitais deslocalizados. Além disso, a molécula é analisada em parâmetros energéticos, através de diagramas, que constituem todo o sistema. Portanto, essa última zona foi chamada de *deslocalização sistemática* para destacar a principal noção de deslocalização de orbitais e por analisar o sistema molecular como um todo.

Para fechar esta seção, respondemos ao problema de pesquisa afirmando que cada uma das quatro zonas do perfil conceitual de ligação covalente apresenta compromissos epistemológicos e ontológicos identificados a partir de três domínios genéticos e que contemplam as seguintes concepções: uma ligação generalizada, chamada de *conectividade indiscriminada*; a exclusividade da natureza atrativa, chamada de *atratividade estabilizadora*; a consideração das repulsões e desestabilizações, chamada de *remanescência localizada*; e a ligação como um processo da estrutura eletrônica, chamada de *deslocalização sistemática*. Além disso, mesmo sendo um conceito que não é utilizado largamente no senso comum, acaba se relacionado com o cotidiano ao fazer parte do repertório do sujeito e, sendo assim, pode apresentar a formação das zonas de um perfil conceitual.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Para concluirmos esta dissertação, acreditamos que, ao desenvolver os procedimentos metodológicos do programa de pesquisa, foi possível apresentar uma proposição para as zonas que contemplam um perfil conceitual de ligação covalente.

O perfil foi proposto a partir da identificação de compromissos epistemológicos e ontológicos identificados nos dados coletados, sendo eles: a revisão narrativa, representando o domínio genético sociocultural; a revisão sistemática, com o domínio ontogenético; e, por último, o questionário com a microgênese.

Destacamos a escolha da revisão narrativa para iniciar a coleta de dados, pois ela permite que se busque sem muitas pretensões do que pode ser encontrado ou uma pergunta clara do que se quer saber. Isso permitiu que tivéssemos contato com teorias ainda não exploradas e que acabaram por compor a nossa narrativa histórica do desenvolvimento do conceito. A revisão sistemática, por outro lado, se mostrou uma grande escolha ao permitir uma busca muito mais controlada e reproduzível, na qual os pesquisadores abrem mais espaço para o questionamento do que a simples revisão comum. Além de permitir outros tipos de análise que não foram, necessariamente, exploradas neste trabalho. Por último, o questionário elaborado a partir da revisão narrativa foi utilizado para reforçar as concepções encontradas na revisão sistemática. O fato de não termos identificado um significado diferente dos demais encontrados, no questionário, foi associado a dois fatores. Primeiramente, a revisão sistemática feita de uma forma muito mais abrangente e incessante no que se refere à quantidade de trabalhos acessados e informações coletadas, inclusive na forma de questionários. Mas também à quantidade extremamente reduzida de sujeitos participantes. Se de um lado consultamos mais de duzentos e cinquenta artigos, que envolveram pesquisas empíricas com incontáveis sujeitos de pesquisa, do outro, pudemos coletar dados apenas de quatro alunos.

Após concluída a etapa de coleta e análise de dados, pudemos construir a matriz semântica que permitiu analisar as informações esquematicamente, além de mostrar a nós mesmos, o quanto o conceito escolhido é polissêmico. Por último, nesta pesquisa, pudemos propor, à luz de todo nosso trabalho, as zonas que constituem o perfil conceitual de ligação covalente. Para isso, analisamos todos os

temas epistemológicos, categorias e compromissos apresentados na matriz semântica e encontramos neles o que havia de comum em relação a uma categorização que pudesse abranger e explicar aqueles significados. Assim, sete temas epistemológicos, divididos entre dezenove categorias foram convertidos em quatro zonas do perfil conceitual. Das quais nomeamos de: *conectividade indiscriminada*, *atividade estabilizadora*, *remanescência localizada* e *deslocalização sistemática*.

Em relação ao programa de pesquisas sobre perfis conceituais, acreditamos ter contribuído, primeiramente com os resultados encontrados especificamente para o conceito, como o próprio perfil conceitual e a matriz semântica, mostrando como o conceito de ligação covalente é bastante polissêmico, fundamentados em pesquisas devidamente apresentadas e analisadas. Além disso, observamos a importância de se explorar mais do procedimento metodológico de revisão da literatura, trazendo uma vertente de sistematização, de forma a aprimorar e fornecer outros tipos de dados para as futuras pesquisas. O uso de dois tipos de revisão se mostrou útil quando a busca necessita de dados específicos ou quando se deseja apenas descobrir o que aquela área pode possuir de interessante ao trabalho.

Acreditamos, ainda, que este trabalho faz parte do programa e tem contribuições potenciais para ele, utilizamos isso para reconhecer a necessidade de uma abordagem do conteúdo, no contexto de ensino de ciências, que considere suas diferentes formas de pensar e modos de falar. A partir de nossa pesquisa, advogamos um ensino com abordagens mais pluralistas e menos excludentes. Dessa forma, destacamos que, assim como tem sido feito por diversos trabalhos no Ensino de Ciências, os resultados do nosso perfil conceitual se apresentam como uma potente ferramenta para futuras pesquisas acerca do tema.

As perspectivas futuras, dentro do próprio programa de pesquisa de perfis conceituais, incluem diversas ações utilizando o perfil elaborado como base. Das quais destacamos a elaboração de sequências ou unidades didáticas que considerem, primeiramente, a polissemia do conceito, assim como a transição entre diferentes zonas, feita de forma consciente e planejada. O perfil conceitual aqui elaborado também pode ser utilizado para analisar textos, como livros, apostilas, artigos científicos, assim como a linguagem através das falas, gestos e símbolos, principalmente, no contexto da sala de aula.

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.
- ARAUJO NETO, W. N. DE. A noção Clássica de valência e o limiar da representação estrutural. **Química Nova na Escola**, v. 7, 2007.
- ATABEK-YIGIT, E. Exploring the relationship between cognitive structure outcomes and test achievements of preservice science teachers on chemical bonding via flow mapping. **Journal of Baltic Science Education**, v. 14, n. 4, p. 524-534, 2015.
- ATKINS, P.; JONES, L. Ligação Química. *In*: **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. Porto Alegre: Bookman, 2012a. p. 55-92.
- ATKINS, P.; JONES, L. Forma e estrutura das moléculas. *In*: Ricardo Bicca De Alencastro (Ed.). **Princípios de química: questionando a vida e o meio ambiente**. 5. ed., Bookman, 2012b. p. 93-130.
- BACHELARD, G. **A filosofia do não**. São Paulo: Abril Cultural, 1984.
- BACHELARD, G. **A formação do espírito científico**. Rio de Janeiro: Contraponto, 1996.
- BALLHAUSEN, C. J.; GRAY, H. B. **Molecular Orbital Theory: An Introductory Lecture Note and Reprint Volume**. Nova York: W. A. Benjamin Inc., 1965.
- BALTIERI, R. S.; BEGO, A. M. **A revisão sistemática na pesquisa sobre perfil conceitual**. 2º Seminário sobre Perfis Conceituais. **Anais...**Recife: 2019
- BAND, Y. B.; AVISHAI, Y. Electronic Structure of Multielectron Systems. *In*: BAND, Y. B.; AVISHAI, Y. B. T. (Eds.). **Quantum Mechanics with Applications to Nanotechnology and Information Science**. Amsterdam: Academic Press, 2013. p. 545-578.
- BIRK, J. P.; KURTZ, M. J. Effect of experience on retention and elimination of misconceptions about molecular structure and bonding. **Journal of Chemical Education**, v. 76, n. 1, p. 124-128, 1999.
- BOO, H. K. Students' Understandings of Chemical Bonds and the Energetics of Chemical Reactions. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 35, n. 5, p. 569-581, 1998.
- BOUAYAD, A. *et al.* Quantum Model of Chemical Bonding: Barriers and Learning Difficulties. **Procedia - Social and Behavioral Sciences**, v. 116, p. 4612-4616, 2014.

BRADY, J. E.; SENESE, F. **Química: a matéria e suas transformações**. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

BROWN, T. L. *et al.* **Química: a ciência central**. 13. ed. São Paulo: Pearson, 2016.

BRUSH, S. G. Dynamics of theory change in chemistry: Part 2. Benzene and molecular orbitals, 1945-1980. **Studies in History and Philosophy of Science Part A**, v. 30, n. 2, p. 263-302, 1999.

CARAMORI, G. F.; DE OLIVEIRA, K. T. Aromaticidade - evolução histórica do conceito e critérios quantitativos. **Química Nova**, v. 32, n. 7, p. 1871-1884, 2009.

CHALMERS, A. F. Teorias como estruturas: os Paradigmas de Kuhn. *In: O que é ciência afinal?* 4. ed. São Paulo: Brasiliense, 1993.

CHASSOT, A. Alquimiando a química. **Química Nova na Escola**, v. 1, p. 20-22, 1995.

CHI, M. T. H. Conceptual Change within and across Ontological Categories: Examples from Learning and Discovery in Science. *In: GIERE, R. N. (Ed.). Cognitive Models of Science*. Minneapolis: University of Minnesota Press, 1992. p. 129-186.

CHINN, C. A.; BREWER, W. F. An Empirical Test of a Taxonomy of Responses to Anomalous Data in Science. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 35, n. 6, p. 623-654, 1998.

CIL, E.; UGRAS, M. the Concept of Hybridization From the Perspective of Science Teaching Undergraduate Students: a Phenomenographic Study. **Journal of Baltic Science Education**, v. 14, n. 2, p. 227-236, 2015.

CLAPP, L. B. Evolution of the Covalent Bond. *In: Chemistry of the Covalent Bond*. São Francisco: W. H. Freeman and Company, 1957. p. 360-392.

CORDEIRO, A. M. *et al.* Revisão sistemática: Uma revisão narrativa. **Revista do Colegio Brasileiro de Cirurgioes**, v. 34, n. 6, p. 428-431, 2007.

COSTA, A. B.; ZOLTOWSKI, A. P. C. Como escrever um artigo de revisão sistemática. *In: KOLLER, S. H.; COUTO, M. C. P. P.; HOHENDORFF, J. V. (Eds.). Manual de Produção Científica*. Porto Alegre: Penso, 2014. p. 55-70.

COUTINHO, F. A. **Construção de um perfil conceitual de vida**. Orientador: Eduardo Fleury Mortimer. 2005. Tese (Doutorado em Educação) Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, 2005.

CRAWFORD, T. D.; SCHAEFER, H. F. An Introduction to Coupled Cluster Theory for Computational Chemists. v. 14, n. Ccd, p. 33-136, 2007.

CRESPO, M. A. G.; POZO, J. L. **Aprender Y Enseñar Ciencia**. Madrid: Morata, 2009.

DISESSA, A. A. A history of conceptual change research: Threads and fault lines. **The Cambridge Handbook of the Learning Sciences**, p. 88-108, 2014.

DRIVER, R.; EASLEY, J. Pupils and Paradigms: a Review of Literature Related to Concept Development in Adolescent Science Students. **Studies in Science Education**, v. 5, n. 1, p. 61-84, 1978.

DUIT, R. Conceptual change approaches in science education. *In*: SCHNOTZ, W.; VOSNIADO, S.; CARRETERO, M. (Eds.). **New perspectives on conceptual change**. Amsterdam: Pergamon, 1999. p. 263-282.

DUIT, R.; TREAGUST, D. F. Conceptual change: A powerful framework for improving science teaching and learning. **International Journal of Science Education**, v. 25, n. 6, p. 671-688, 2003.

DUNCAN, A. **Laws and order in eighteenth - century chemistry**. Oxford: Oxford University Press, 1996.

EL-HANI, C. N. *et al.* Conceptual Profiles: Theoretical-methodological Grounds and Empirical Studies. **Procedia - Social and Behavioral Sciences**, v. 167, p. 15-22, 2015.

EL-HANI, C. N.; MORTIMER, E. F. Multicultural education, pragmatism, and the goals of science teaching. **Cultural Studies of Science Education**, v. 2, n. 3, p. 657-702, 2007.

EYMUR, G.; GEBAN, Ö. The Collaboration of Cooperative Learning and Conceptual Change: Enhancing the Students' Understanding of Chemical Bonding Concepts. **International Journal of Science and Mathematics Education**, v. 15, n. 5, p. 853-871, 2017.

FERNANDEZ, C.; RIBEIRO, M. E. M. Concepções dos estudantes sobre Ligação Química. **Química Nova Na Escola**, n. 24, p. 20-24, 2006.

FILGUEIRAS, C. A. L. Gilbert lewis e o centenário da teoria de ligação por par de elétrons. **Química Nova**, v. 39, n. 10, p. 1262-1268, 2016.

FREIRE, M. S. **Perfil Conceitual de Química**: contribuições de uma análise da natureza da química e seu ensino. Orientadora: Edenia Maria Ribeiro do Amaral. 2017. Tese (Doutorado em Ensino de Ciências). Universidade Federal Rural de Pernambuco, Pernambuco, 2017.

GILLESPIE, R. J.; NYHOLM, R. S. Inorganic stereochemistry. **Quarterly Reviews Chemical Society**, v. 11, n. 4, p. 339-380, 1957.

GODDARD, W. A. *et al.* Generalized Valence Bond Description of Bonding in Low-Lying States of Molecules. **Accounts of Chemical Research**, v. 6, n. 11, p. 368-376, 1973.

HEISENBERG, W. Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik. **Zeitschrift für Physik**, v. 38, n. 6-7, p. 411-426, 1926.

JENKINS, J. L.; SHOOPMAN, B. T. Identifying misconceptions that limit student understanding of molecular orbital diagrams. **Science Education International**, v. 30, n. 3, p. 152-157, 2019.

JONES, R. O. Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. **Reviews of Modern Physics**, v. 87, n. 3, p. 897-923, 2015.

JUSTI, R. DA S. A afinidade entre as substâncias pode explicar as reações químicas? **Química Nova Na Escola**, v. 7, p. 26-29, 1998.

KABAPINAR, F. Secondary Students' Reference to Properties of Matter to Chemical Bonds: Is the Onus on the Ontological Mismatch Only? **Hacettepe Üniversitesi Journal of Education**, v. 28, n. 28-3, p. 235-249, 2013.

KELLY, J.; KRAUSE, S.; BAKER, D. A pre-post topic assessment tool for uncovering misconceptions and assessing their repair and conceptual change. **Proceedings - Frontiers in Education Conference**, p. T1G-1- T1G-6, 2010.

KIND, V. A Degree Is Not Enough: A quantitative study of aspects of pre-service science teachers' chemistry content knowledge. **International Journal of Science Education**, v. 36, n. 8, p. 1313-1345, 2014.

KUHN, T. S. Second Thoughts on Paradigms. *In*: **The Essential Tension**. Chicago: The University of Chicago Press, 1977. p. 293-319.

KUZNETSOV, V. I. **Theory of Valency in progress**. Moscow: Mir Publishers, 1980.

LAKOFF, G. **Woman, fire and dangerous things**. Chicago: The University of Chicago Press, 1987.

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

LAVILLE, C.; DIONNE, J. Em busca de informações. *In*: **Construção do saber: manual de metodologia da pesquisa em ciências humanas**. Belo Horizonte: Editora UFMG, 1999.

LEISCHESTER, H. M.; KLICKSTEIN, H. S. Jöns Jacob Berzelius. *In*: **A Source Book in Chemistry**. Cambridge: Harvard University Press, 1965. p. 258-268.

LEWIS, G. N. Valence and tautomerism. **Journal of the American Chemical Society**, v. 35, n. 10, p. 1448-1455, 1913.

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

LEWIS, G. N. Introductory address: Valence and the electron. **Transactions of the Faraday Society**, v. 19, p. 452-458, 1923.

LUXFORD, C. J.; BRETZ, S. L. Development of the bonding representations inventory to identify student misconceptions about covalent and ionic bonding representations. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 3, p. 312-320, 2014.

MACHADO, A. H.; ARAGÃO, R. M. R. DE. Como os estudantes concebem o estado de Equilíbrio Químico. **Química Nova Na Escola**, n. 4, p. 18-20, 1996.

MAHAN, B. M.; MYERS, J. Valência e Ligação Química. *In: Química um curso universitário*. 4. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 1995. p. 143-167.

MARTON, F. Phenomenography - describing the world around us. **Instructional Science**, v. 10, p. 177-200, 1981.

MATTOS, C. R. DE. Conceptual Profile as a Model of a Complex World. *In: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Eds.). Conceptual Profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts*. Berlin: Springer, 2014. p. 330.

MCGRADY, G. S.; DOWNS, A. J. Molecules with hydride or alkyl ligands and including d0 transition metal centers: Problem cases for the simple VSEPR model. **Coordination Chemistry Reviews**, v. 197, n. 1, p. 95-124, 2000.

MORTIMER, E. F. Conceptual change or Conceptual Profile change? **Science & Education**, v. 4, n. 3, p. 267-285, 1995.

MORTIMER, E. F. **Linguagem e Formação de Conceitos no Ensino de Ciências**. 2. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2011.

MORTIMER, E. F. *et al.* Conceptual Profiles: Theoretical - Methodological Bases of a Research Program. *In: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Eds.). Conceptual Profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts*. Berlin: Springer, 2014. p. 3-30.

MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. **Conceptual Profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. Berlin: Springer, 2014.

MORTIMER, E. F.; MIRANDA, L. C. Transformações: concepções de estudantes sobre reação química. **Química Nova Na Escola**, n. 2, p. 23-26, 1995.

MULLIKEN, R. S. The path to molecular orbital theory. **Pure and Applied Chemistry**, v. 24, n. 1, p. 203-215, 1970.

MURRELL, J. N. The origins and later developments of molecular orbital theory. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 112, n. 17, p. 2875-2879, 2012.

NICOLL, G. A report of undergraduates' bonding misconceptions. **International Journal of Science Education**, v. 23, n. 7, p. 707-730, 2001.

NICOLLI, A. A. **Perfi Conceitual de morte e a abordagem pedagógica do ciclo de vida, no ensino de ciências**. Orientador: Eduardo Fleury Mortimer. 2009. Tese (Doutorado em Educação). Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, 2009.

NICOLLI, A. A.; MORTIMER, E. F. Building a Profile Model for the Concept of Death. *In*: MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. (Eds.). **Conceptual Profiles: A theory of teaching and learning scientific concepts**. Belo Horizonte: Springer, 2014. p. 293-321.

NIMMERMARK, A. *et al.* Teaching of chemical bonding: A study of Swedish and South African students' conceptions of bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 17, n. 4, p. 985-1005, 2016.

NOGUEIRA, H.; PORTO, P. Entre Tipos E Radicais: a Construção Do Conceito De Valência. **Química Nova**, v. 42, n. 1, p. 117-127, 2018.

ORTONY, A. Why Metaphors Are Necessary and Not Just Nice. **Educational Theory**, v. 25, p. 45-54, 1975.

OTHMAN, J.; TREAGUST, D. F.; CHANDRASEGARAN, A. L. An investigation into the relationship between students' conceptions of the particulate nature of matter and their understanding of chemical bonding. **International Journal of Science Education**, v. 30, n. 11, p. 1531-1550, 2008.

ÖZMEN, H.; DEMIRCIOĞLU, H.; DEMIRCIOĞLU, G. The effects of conceptual change texts accompanied with animations on overcoming 11th grade students' alternative conceptions of chemical bonding. **Computers and Education**, v. 52, n. 3, p. 681-695, 2009.

PAULING, L. **The nature of the chemical bond**. 3. ed. Nova York: Cornell University Press, 1960.

PIAGET, J. **The child's conception of the world**. Nova York: Harcourt Brace, 1929.

POSNER, G. J. *et al.* Accommodation of a scientific conception: Toward a theory of conceptual change. **Science education**, v. 66, n. 1968, 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**. Orientador: Claudia de Alencar Serra e Sepulveda. 2018. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências). Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2018.

SALAH, H.; DUMON, A. Conceptual integration of covalent bond models by Algerian students. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, n. 4, p. 675-688, 2014.

SALAH, H.; DUMONB, A. Conceptual integration of hybridization by Algerian students intending to teach physical sciences. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 12, n. 4, p. 443-453, 2011.

SANMARTÍ, N. **Didáctica de las ciencias en la educación secundaria obligatoria**. 2ª ed. Madrid: Síntesis, 2009.

ŞEN, Ş.; VAROĞLU, L.; YILMAZ, A. Cognitive Structures and Misconceptions with a Thematic Framework: The Case of Chemical Bonding. **Journal of Education and Future**, n. December, p. 65-78, 2019.

SEPULVEDA, C.; MORTIMER, E. F.; EL-HANI, C. N. Construção de um Perfil Conceitual de Adaptação: Implicações Metodológicas para o Programa de Pesquisa sobre Perfis Conceituais e o Ensino de Evolução. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 18, n. 2, p. 439-479, 2013.

SHAIK, S.; HIBERTY, P. C. A brief story of valence bond theory. In: **A Chemist's Guide to Valence Bond Theory**. Nova Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2008. p. 1-25.

SIDGWICK, N. V; POWELL, H. M. **Stereochemical Types and Valency Groups**. Proceedings of the Royal Society of London. **Anais...Londres**: The Royal Society, 1940

SILVA, J. R. R. T. DA. **Um perfil conceitual para o conceito de substância**. Orientadora: Edenia Maria Ribeiro do Amaral. 2011. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências). Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2011.

SILVA, J. R. R. T. DA; AMARAL, E. M. R. DO. Proposta de um Perfil Conceitual para Substância. **Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 13, n. 3, p. 53-72, 2013.

SILVA, M. G. L. DA; SILVA, A. F. DA; NUÑEZ, I. B. Dos modelos de mudança conceitual à aprendizagem como pesquisa orientada. In: ISAURO BELTRÁN NUÑEZ; RAMALHO, B. L. (Eds.). **Fundamentos do Ensino-Aprendizagem das Ciências Naturais e da Matemática: o novo Ensino Médio**. Porto Alegre: Editora Meridional, 2004. p. 226-244.

SODRÉ, F. C. R. **Física para uma alimentação saudável**. São Paulo: Universidade de São Paulo, 6 jul. 2018.

SOLSONA, N.; IZQUIERDO, M.; JONG, O. DE. Un Estudio de la Evolución de los Perfiles Conceptuales del Alumnado sobre la Reacción Química. **Revista de Educación en Ciencias**, v. 2, n. 1, p. 44-48, 2001.

SOMMERS, F. Structural ontology. **Philosophia**, v. 1, n. 1, p. 21-42, 1971.

STEFANI, C.; TSAPARLIS, G. Students' levels of explanations, models, and misconceptions in basic quantum chemistry: A phenomenographic study. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 46, n. 5, p. 520-536, 2009.

STRIKE, K. A.; POSNER, G. J. A revisionist theory of conceptual change. *In*: DUSCHL, R. A.; HAMILTON, R. J. (Eds.). **Philosophy of science, cognitive psychology, and educational theory and practice**. Nova York: State University of New York Press, 1992. p. 146-176.

TEMEL, S.; ÖZCAN, Ö. The Analysis of Prospective Chemistry Teachers' Cognitive Structure: The Subject of Covalent and Ionic Bonding. **EURASIA Journal of Mathematics, Science & Technology Education**, v. 12, n. 8, p. 1953-1969, 2016.

TOPLIS, R. Probing student teachers' subject content knowledge in chemistry: case studies using dynamic computer models. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 9, p. 11-17, 2008.

VASCONCELOS, M. S. Aproximação entre Piaget e a Educação no Brasil. *In*: **A difusão das ideias de Piaget no Brasil**. São Paulo: Casa do Psicólogo, 1996. p. 291.

VON GLASERSFELD, E. Cognition, construction of knowledge, and teaching. **Synthese**, v. 80, n. 1, p. 121-140, 1989.

VOSNIADOU, S. Reframing the Classical Approach to Conceptual Change: Preconceptions, Misconceptions and Synthetic Models. *In*: FRASER, B. J.; TOBIN, K. G.; MCROBBIE, C. J. (Eds.). . **Second International Handbook of Science Education**. Atenas: Springer, 2012. p. 119-130.

WALLAU, W. M. Química na poesia e poesia na química. **Química Nova**, v. 37, n. 10, p. 1721-1731, 2014.

WELLS, G. Learning to use scientific concepts. **Cultural Studies of Science Education**, v. 3, n. 2, p. 329-350, 2008.

WERTSCH, J. V. The social origins of higher mental functions. *In*: **Vygotsky and the social formation of mind**. Harvard University Press, 1985. p. 58-76.

WILSON, E. B. Four-dimensional electron density function. **The Journal of Chemical Physics**, v. 36, n. 8, p. 2232-2233, 1962.

ZOHAR, A. R.; LEVY, S. T. Students' reasoning about chemical bonding: The lacuna of repulsion. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 56, n. 7, p. 881-904, 2019.

APÊNDICES

APÊNDICE 1:

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?

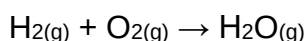
2 – O que é ligação covalente?

3 – Considere os seguintes símbolos:

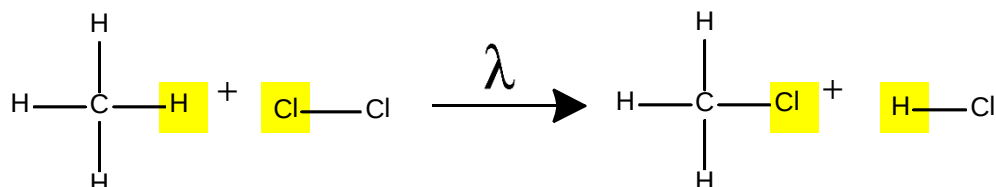
Hidrogênio (H): ○

Oxigênio (O): ⊕

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

O₂

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 2:
Termo de Consentimento Livre e
Esclarecido

Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

ELEMENTOS BÁSICOS DE CARACTERIZAÇÃO DA PESQUISA	
Instituição	Instituto de Química – Unesp – <i>Campus</i> Araraquara
Departamento	Química Geral e Inorgânica
Pesquisador Responsável	RICARDO SANTOS BALTIERI
Título do Projeto	Uma proposta de perfil conceitual para o conceito de ligação covalente
Objetivo	Pretende-se investigar quais as concepções dos alunos sobre ligação química e, especificamente, ligação covalente.

1. Abordagem de Pesquisa

Optamos pela abordagem qualitativa de pesquisa. Essa abordagem mostra-se mais apropriada aos objetivos desse projeto, já que tem como pretensão compreender de forma detalhada atribuindo características e propriedades de modo a qualificar os fenômenos sociais abordados.

2. Direitos dos Participantes:

Os envolvidos nessa pesquisa têm o direito de receber esclarecimentos acerca da investigação desenvolvida antes ou durante o curso desse estudo seja com o Comitê de Ética e Pesquisa (CEP) da Unesp ou com o pesquisador responsável. Também possuem o direito de retirar o termo de consentimento em qualquer fase de desenvolvimento da pesquisa ou mesmo recusar sua participação sem qualquer penalização ou prejuízo ao seu cuidado.

3. Direito de Confidencialidade:

As informações obtidas serão analisadas e divulgadas, quando autorizadas pelos participantes, de forma a evitar sua identificação, utilizando-se para isso códigos e números.

4. Acesso às Informações da Pesquisa:

É assegurado aos participantes da pesquisa o direito de serem informados sobre os resultados parciais e finais da investigação, quando em estudos abertos, ou resultados que sejam do conhecimento dos pesquisados.

5. Compromisso dos Pesquisadores:

Os pesquisadores devem utilizar os dados e os materiais coletados somente para contemplar os objetivos propostos por essa investigação.

Você está recebendo uma cópia deste termo onde consta o telefone e o endereço do pesquisador principal, podendo tirar suas dúvidas sobre o projeto e sua participação, agora ou a qualquer momento.

RICARDO SANTOS BALTIERI
Programa de Pós-graduação em Química
Instituto de Química - Unesp
(19) 99401-5885
ricardo.baltieri@unesp.br

Após a leitura do exposto acima, acredito ter sido suficientemente informado a respeito da pesquisa “uma proposta de perfil conceitual para o conceito de ligação covalente”. Declaro para os devidos fins que entendi os objetivos, riscos e benefícios de minha participação na pesquisa e concordo em participar.

Local e data: _____ / _____ / _____

(nome completo e assinatura)

APÊNDICE 3:
**Concepções levantadas na literatura
e excluídas dos dados**

Quadro 23 - Concepções excluídas da análise dos dados

Ligação covalente não é uma ligação química
Carga iônica determina a polaridade da ligação
Os pontos representam todos os elétrons em um composto
Ligação metálica ocorre entre metais com transferência de elétrons
Todas ligações covalentes são apolares
Não há distinção hidrogênios ligados a carbono ou oxigênio na molécula
Ligação covalente como transferência de elétrons
Metano desenhado com ligações covalentes duplas
Estrutura de Lewis é a geometria da molécula
Estrutura de Lewis da molécula é desenhar linhas entre os átomos de forma a completar 8 elétrons
Ligação iônica é atração entre cargas
Compostos iônicos existem na forma de uma rede
Ligações iônicas não são afetadas pelo processo de dissolução
Existem vários tipos de ligações intermoleculares
Ligação de hidrogênio é uma ligação intermolecular e a ligação mais forte
A energia da ligação intermolecular é determinada pela energia da ligação covalente
Orbitais atômicos são iguais para todos os átomos
A equação de Schrodinger não se aplica às moléculas
Sólidos covalentes apresentam forças intermoleculares fortes
Quanto maior o átomo, mais eletronegativo
Ametais não formam cátion
Átomos eletronegativos ficam mais estáveis se adquirirem uma carga negativa
Ligação representada com sinais de + e -

Fonte: elaboração própria.