



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO**  
**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**  
**PROGRAMA DE MESTRADO PROFISSIONAL EM QUÍMICA EM REDE**  
**NACIONAL**

**RONALD SILVA DOS PRAZERES**

**A HISTÓRIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA: DO EMPÍRICO À TEORIA QUÂNTICA**

Recife

2025

RONALD SILVA DOS PRAZERES

## **A HISTÓRIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA: DO EMPÍRICO À TEORIA QUÂNTICA**

Dissertação submetida à banca do Programa de Mestrado Profissional em Química em Rede Nacional – PROFQUI para obtenção do título de mestre em Química.

**Orientador:** Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares Neto

Recife

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema Integrado de Bibliotecas da UFRPE  
Biblioteca Central, Recife-PE, Brasil

P921h Prazeres, Ronald Silva dos  
A história da ligação química: do empírico à teoria quântica /  
Ronald Silva dos Prazeres. – 2025.  
132 f.: il.

Orientador(a): Luciano de Azevedo Soares Neto.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal Rural de  
Pernambuco, Programa de Mestrado Profissional em Química em  
Rede Nacional, Recife, BR-PE, 2025.  
Inclui referências e apêndice(s).

1. Ligações químicas 2. Teoria quântica 3. Ciência – História  
I. Soares Neto, Luciano de Azevedo, orient. II. Título

CDD 540

# **A HISTÓRIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA: DO EMPÍRICO À TEORIA QUÂNTICA**

Aprovada em:

## **BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares Neto  
Universidade Federal Rural de Pernambuco – UFRPE  
Orientador

---

Prof. Dr. Joacy Vicente Ferreira  
Universidade Federal de Pernambuco – UFPE  
1ª Examinador

---

Prof. Dr. Gilson Bezerra da Silva  
Instituto Federal de Pernambuco – IFPE  
2º Examinador

*O que mais nos assusta é a nossa vida e não a escuridão*

**(Ken Carter, “Coach Carter”)**

## **AGRADECIMENTOS**

De maneira geral, gostaria de agradecer a todos que fizeram parte da minha trajetória até eu chegar ao ponto de concluir um mestrado em Química em uma universidade pública federal. Foram tantos momentos difíceis durante toda a minha vida que seria impossível concluir esta etapa importante sem a ajuda de muitas pessoas.

Agradeço muito a minha família: Roberval (meu pai), Maria José (minha mãe), Cícera (minha avó), Mariana (minha irmã), Robert (meu irmão), Ruan (meu irmão) e Renan (meu irmão), que apesar de tantos problemas sempre estiveram com o pensamento positivo e confiantes que eu iria conseguir me formar, além de sempre ajudarem quando eu mais precisei.

Agradeço à minha esposa Larissa Fernanda por estar comigo todos os dias, do Ensino Médio até agora. Ela sempre me deu o suporte necessário em todas as fases que passamos juntos.

Agradeço a todos os meus amigos de infância, das escolas em que estudei, da universidade e das escolas que trabalhei e trabalho.

Agradeço especialmente aos que estiveram presentes no período em que cursei este mestrado: grupo Paranoia, grupo RAF, grupo Alunos PROFQUI 2023.1 e colegas de trabalho.

Agradeço muito ao meu orientador Luciano de Azevedo Soares Neto, que esteve presente desde a minha graduação ministrando a disciplina de Físico-Química II em 2022.

## RESUMO

O presente estudo propõe a utilização da História da Ciência no ensino de Química, com foco no tema “ligação química”, indo das propostas empíricas até a teoria quântica. A motivação para esta pesquisa surgiu da observação de que a maioria dos materiais didáticos de ensino médio e até mesmo de ensino superior se limitam a abordar apenas os tipos das ligações químicas e seus fundamentos, sem explorar como as propostas evoluíram ao longo dos anos. Abordar a história das teorias das ligações químicas no ensino médio amplia a discussão sobre o tema e ajuda a difundir a abordagem do conteúdo em sala de aula. Para servir de suporte ao professor de Química ao abordar o tema “ligação química”, propomos um material em formato de *eBook* sobre a História da ligação química. Esse *eBook* foi enviado à professores de Química para ser avaliado e em seguida foi feita uma análise das contribuições desses professores para obtermos os resultados da pesquisa que, de maneira geral, foram favoráveis, indicando que é possível inserir a abordagem histórica das teorias de ligações químicas nas aulas de ensino médio, dando a ela a sua devida importância. O desenho desta pesquisa tem como pontos centrais: a caracterização da pesquisa, o contexto da pesquisa, os participantes da pesquisa, as etapas metodológicas, os instrumentos de produção de dados, a proposta de produto educacional e os aspectos éticos da pesquisa. O *eBook* estará disponível online gratuitamente, permitindo amplo acesso a quem interessar.

**Palavras-chave:** ligação química; história da ciência; teoria quântica.

## ABSTRACT

This study proposes the use of the History of Science in the teaching of Chemistry, focusing on the theme of “chemical bonding,” ranging from empirical proposals to quantum theory. The motivation for this research arose from the observation that most teaching materials in high school and even higher education are limited to addressing only the types of chemical bonds and their fundamentals, without exploring how the proposals have evolved over the years. Addressing the history of chemical bonding theories in high school broadens the discussion on the topic and helps to disseminate the approach to the content in the classroom. To support chemistry teachers in addressing the topic of “chemical bonding,” we propose an eBook format material on the history of chemical bonding. This eBook was sent to chemistry teachers for evaluation, and then an analysis of these teachers' contributions was carried out to obtain the results of the research, which, in general, was favorable, indicating that it is possible to include the historical approach to chemical bonding theories in high school classes, giving it its due importance. The design of this research has as its central points: the characterization of the research, the context of the research, the research participants, the methodological steps, the data production instruments, the educational product proposal, and the ethical aspects of the research. The eBook will be available online for free, allowing wide access to anyone interested.

**Keywords:** chemical bond; history of science; quantum theory.



## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	9
1.2 OBJETIVOS.....	12
1.2.1 Objetivo Geral .....	12
1.2.2 Objetivos Específicos.....	12
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....	13
2.1 A IMPORTÂNCIA DA HISTÓRIA DA CIÊNCIA NO ENSINO.....	13
2.2 TEORIAS DE LIGAÇÕES QUÍMICAS.....	16
2.2.1 Aspectos históricos .....	16
2.2.2 A teoria eletroquímica da ligação química (teoria dualística) .....	20
2.2.3 A teoria positivo-negativa .....	21
2.2.4 A teoria da ligação de Lewis (teoria do par eletrônico) .....	25
2.2.5 Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons Livres (modelo VSEPR) .....	36
2.2.6 Teoria da Ligação de Valência (TLV).....	42
2.2.7 Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM).....	46
2.2.8 Teoria do Loge .....	52
3 METODOLOGIA.....	55
3.1 CARACTERIZAÇÃO DA PESQUISA .....	55
3.2 CONTEXTO DA PESQUISA.....	56
3.3 PARTICIPANTES DA PESQUISA .....	57
3.4 ETAPAS METODOLÓGICAS .....	57
3.5 INSTRUMENTOS DE PRODUÇÃO E COLETA DE DADOS.....	59
3.6 PROPOSTA DE PRODUTO EDUCACIONAL .....	59
3.7 ASPECTOS ÉTICOS DA PESQUISA .....	60
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	61
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	71
REFERÊNCIAS .....	72
APÊNDICE 1 .....	78
APÊNDICE 2 .....	82

## 1 INTRODUÇÃO

Este trabalho propõe a utilização da História da Ciência no ensino de Química, com foco na história da Ligação Química. A Química está presente direta ou indiretamente na vida das pessoas. Por isso, o interesse por essa ciência pode colaborar para o desenvolvimento intelectual e científico dos estudantes. A presença da Química no cotidiano é notável em diversos contextos, como, por exemplo: nos alimentos, nos produtos de limpeza, nos medicamentos, nos materiais de construção, entre outros.

Na maioria das vezes, ligações químicas é um conteúdo abordado no ensino médio de forma desconectada da história da ciência, fazendo com que os estudantes não construam um conhecimento alicerçado pelos conceitos envolvidos no processo de aprendizagem. Segundo Fernandez e Marcondes (2006, p.20): “O tema ligação química, por ser abstrato, longe das experiências dos alunos, tem, conseqüentemente, grande potencial para gerar concepções inadequadas por parte dos estudantes”.

Para Henrique E. Toma (1997):

As ligações químicas representam um assunto de fundamental importância, e seu conhecimento é essencial para um melhor entendimento das transformações que ocorrem em nosso mundo (TOMA, 1997, p. 1)

A natureza do conhecimento científico é multimodal, ou seja, o processo de ensino usa vários meios de representação além da linguagem verbal, como, por exemplo: os gráficos, diagramas, figuras, símbolos, equações, modelos, entre outros (QUADROS; SILVA; MORTIMER, 2018). Para o entendimento das teorias de ligações químicas, é essencial a utilização de figuras, símbolos e modelos. Esses meios de representação serão bastante utilizados na proposta apresentada nesta pesquisa.

Gilbert Newton Lewis (1875-1946) é apresentado nos livros didáticos como o primeiro cientista a propor uma teoria sobre a ligação química para explicar a interação dos átomos resultando na formação de composto. No entanto, antes de Lewis, outros químicos propuseram ideias sobre as ligações químicas, mas não aparecem na grande maioria dos livros didáticos (FILGUEIRAS, 2016).

As tentativas mais antigas para explicar as interações entre as substâncias podem ser encontradas com os filósofos gregos Empédocles e Hipócrates (séc. V a.C.). Eles atribuíam sentimentos como amor e ódio aos elementos, como se os átomos fossem seres humanos e acreditavam que a atração ou repulsão das substâncias estavam relacionadas a estes sentimentos. No século seguinte, Aristóteles (séc. IV a.C.) também cita fatores que podem influenciar a ocorrência de uma transformação, encontrando afinidades e diferenças entre as substâncias. Até o século XVII, as ideias sobre afinidade entre as substâncias influenciaram o pensamento de cientistas, passando pelo período da alquimia com atenção voltada para as transformações e formação de substâncias, revelando alguns registros de que as substâncias não se combinavam porque possuíam sentimentos, mas por suas semelhanças (JUSTI, 1998).

Para Manoela Navarro, Marina Félix e Tathiane Milaré (2015): “Muitos estudantes podem se perguntar: por que a História da Ciência é importante? A resposta é que as teorias científicas não vieram por acaso. Para cada teoria, houve um tempo bastante considerável de estudos e pesquisas para que as propostas teóricas fizessem sentido e fossem aceitas pela comunidade científica”.

Muitas vezes os estudantes veem as Ciências como um campo em que as respostas milagrosamente acontecem, visto que no livro didático estas respostas vêm prontas, não exigindo raciocínio a respeito da teoria abordada. Ainda segundo Manoela Navarro, Marina Félix e Tathiane Milaré (2015): “os estudantes precisam saber como a Ciência foi desenvolvida, como se chegaram às teorias e suas respostas, para que saibam que toda a formação deste campo levou muitos anos de análises e pesquisas e, ainda, que este campo não é absoluto. A Ciência é passível de erros e mudanças e sofre influências diversas de aspectos econômicos, políticos e sociais”.

A importância da abordagem histórica no ensino da química encontra-se proposta nos Parâmetros Curriculares Nacionais (PCN) (BRASIL, 1999). O documento ainda explicita alinhamento com a concepção historiográfica social, ao afirmar que o conhecimento químico não deve ser compreendido como um conjunto de conhecimentos isolados, que são prontos e acabados, mas sim como uma construção da mente humana, em mudança constante. A História da Química, deve atravessar todo o ensino de Química e possibilitar o estudante a compreensão do processo de elaboração desse conhecimento levando em consideração seus avanços, erros e conflitos. (BRASIL, 1999).

O Guia do Programa Nacional do Livro Didático do Ensino Médio (PNLEM) de Química, fornece subsídios para a avaliação dos livros didáticos a serem utilizados nas escolas públicas do Brasil no ano de 2018 e também consolida a importância da História da Ciência. O PNLEM salienta que a compreensão histórica da ciência deve considerar aspectos como a natureza da ciência, a relação dos cientistas com o conhecimento químico, a construção coletiva da ciência e sua provisoriade” (BRASIL, 2018).

Nesse trabalho propomos um produto educacional (manual explicativo em formato de *eBook*) que servirá de apoio ao docente de química do ensino médio quando ele for abordar o tema ligação química contemplando a história envolvida no tema ligação química.

Diante do exposto, este trabalho justifica-se pela necessidade de ampliar a discussão sobre a história das teorias de ligações químicas, indo um pouco além do que já é visto em salas de aula do ensino médio, estimulando o interesse e a participação dos estudantes nas aulas, visto que é um conteúdo de cunho mais teórico e que exige certo nível de abstração por partes dos estudantes e dos professores.

## 1.1 QUESTÃO PROBLEMA

Como consequência da nossa justificativa, nosso problema de pesquisa é: quais as contribuições dos professores de Química sobre a viabilidade da utilização de um manual explicativo em formato de *eBook* sobre a história da ligação química no Ensino Médio?

## 1.2 OBJETIVOS

### 1.2.1 Objetivo Geral

Criar um manual explicativo em formato de *eBook* para professores de Química do Ensino Médio sobre a história da ligação química.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

- Realizar uma pesquisa bibliográfica abrangente sobre a História da ligação química;
- Avaliar a eficácia e a aplicabilidade do manual explicativo em formato de *eBook* elaborado para docentes de Química do Ensino Médio;
- Analisar as contribuições dos docentes de Química do Ensino Médio acerca do manual explicativo em formato de *eBook* elaborado.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 A IMPORTÂNCIA DA HISTÓRIA DA CIÊNCIA NO ENSINO

A introdução da história da ciência no ensino de Química contribui para a formação integral dos estudantes. Ao apresentar a produção científica como um processo dinâmico e evolutivo, a história da ciência colabora para que os estudantes entendam que o conhecimento científico não é estático, mas está em desenvolvimento constante. Isso pode desenvolver nos estudantes uma visão mais crítica da ciência, encorajando-os a questionarem e investigarem as informações.

Para cada teoria científica, há um longo tempo de estudos e pesquisas para que as propostas teóricas façam sentido e sejam aceitas pela comunidade científica. Nesse tempo são feitas análises e pesquisas e, ainda assim o conhecimento construído não é absoluto. A Ciência está sempre sujeita a erros e mudanças, sofrendo influências sociais, políticas e econômicas.

A História das Ciências, além de propiciar a compreensão crítica do pensamento científico contemporâneo, permite demonstrar o caráter histórico e, portanto, de mobilidade dos processos e dos métodos científicos. Sua introdução, como conteúdo programático ou metodologia de ensino, auxilia na compreensão da complexa relação ciência e sociedade, que ocorre nos níveis político, econômico, cultural e institucional. Neste sentido, a História das Ciências deve revelar: a interdependência de fatores científicos e extra científicos na própria construção do conhecimento científico; a interferência de políticas gerais ou específicas no direcionamento de linhas e/ou no estabelecimento de prioridades de pesquisa; a relação inextricável e dinâmica entre o saber técnico-científico e os diferentes contextos culturais, entre outros (SILVA; FIGUEIRÔA, et al., 2008, p. 514).

O estudo histórico revela a ciência como um empreendimento coletivo, desenvolvido gradualmente, com suas limitações, erros, acertos e procedimentos que nem sempre alcançam os resultados desejados. Esse percurso histórico torna a ciência mais humana, mostrando que ela é realizada por pessoas comuns, sujeitas a erros. As ciências são constantemente aperfeiçoadas através de debates, críticas e

novos desenvolvimentos na comunidade científica, o que pode levar à transformação dos conceitos originais aceitos (CELESTINO, 2022).

A abordagem histórica no processo de ensino é benéfica porque o processo de compreensão dos estudantes pode refletir o desenvolvimento da própria ciência. Os estudantes podem experimentar dúvidas, questionamentos e confusões semelhantes aos enfrentados durante a criação da ciência (CELESTINO, 2022).

Influenciados por movimentos como "concepções alternativas" e "mudança conceitual", os primeiros programas governamentais mencionaram o Ensino de Ciências, na década de 1960. Esses movimentos introduziram novas perspectivas no ensino de ciências, que não haviam sido consideradas antes. Com o aprofundamento das discussões, surgiram estudos e críticas visando melhorar o ensino e a aprendizagem. Contudo, tanto o modelo americano quanto o europeu apresentaram falhas ao ignorar as discussões e teorias sobre Filosofia da Ciência, criando uma lacuna entre a Filosofia da Ciência e o Ensino de Ciências, como apontado por Kuhn, Popper, Lakatos e Feyerabend na Conferência Internacional sobre Filosofia da Ciência de 1965 (MATTHEWS, 1995; VILLANI, 2001).

Manoela Navarro, Marina Félix e Tathiane Milaré (2015) exploraram a inclusão da história da química em livros didáticos antes e depois do Programa Nacional do Livro Didático para o Ensino Médio (PNLEM) e constataram que, embora a presença da história da química tenha aumentado, não é tratada como enfoque de análise e as referências são muitas vezes superficiais, limitando-se a nomes e datas sem fornecer contexto adequado ou explorar o processo científico detalhado, sendo insuficiente para conectar os estudantes com a química e desmistificar a visão imediatista da ciência.

Já Ronaldo Pires, Carmem Amaral e Wagner Palanch (2019) fizeram a análise de dissertações e teses disponíveis no portal da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) e defendidas no período de 2008 a 2017 sobre a inclusão da história da ciência em livros didáticos de química. Eles observam que a história da ciência é frequentemente apresentada de maneira superficial, com menções limitadas a cientistas famosos e suas descobertas, sem fornecer um contexto histórico ou cultural adequado. O estudo destaca a necessidade de uma abordagem mais crítica e integrada que considere as complexidades e desafios

históricos enfrentados pela ciência, ressaltando a importância da contextualização nas descobertas científicas para evitar a visão de ciência como algo fixo e imutável.

Maria Fernandes e Paulo Porto (2012) analisaram a presença da história da ciência em três livros didáticos de Química Geral para o ensino superior utilizados no Brasil. Os livros analisados são traduções de "*Chemistry & Chemical Reactivity*" de Kotz e Treichel, "*Chemical Principles*" de Atkins e Jones, que têm sido largamente utilizados em cursos introdutórios de química e "Química" de Garritz e Chamizo. Eles observaram que a história é frequentemente tratada como uma curiosidade ou ornamento, sem uma integração profunda com os conceitos científicos em "*Chemistry & Chemical Reactivity*" de Kotz e Treichel, "*Chemical Principles*" de Atkins e Jones. Já Garritz e Chamizo foram elogiados pelo livro "Química" por utilizarem a história como um eixo organizacional que proporciona uma compreensão mais profunda dos conceitos químicos.

O artigo de Maria Fernandes e Paulo Porto (2012) destaca a importância dos livros didáticos na formação dos estudantes, influenciando suas percepções sobre a ciência e o conhecimento científico. A análise considera aspectos como a caracterização dos cientistas, a evolução da ciência, os materiais utilizados para apresentar a informação histórica, e o contexto em que a história é abordada. No final, os autores concluem que, embora Garritz & Chamizo apresentem uma abordagem mais aprofundada e abrangente, há ainda espaço para melhorar a forma como a história da ciência é apresentada nos livros didáticos em geral, sugerindo que uma integração mais cuidadosa e crítica da história da ciência poderia enriquecer o ensino de química.

Em estudo realizado por Marcos Paulo Hirayama e Paulo Porto (2021), os autores investigam como elementos da história e filosofia da química são incorporados por professores do ensino médio em suas práticas de ensino, discutindo a importância de incluir elementos de história e filosofia da química no currículo. Os resultados mostram que os professores consideram relevantes certos aspectos históricos e filosóficos da ciência e os incluem em suas práticas, mas muitas vezes essas abordagens se limitam a exemplos isolados ou a discussões superficiais. Isso pode restringir a compreensão dos estudantes sobre a complexidade da ciência.



O artigo de Marcos Paulo Hirayama e Paulo Porto (2021) destaca a necessidade de uma maior integração de aspectos históricos e filosóficos no ensino de química, visando uma educação que promova uma compreensão mais profunda da ciência como um empreendimento humano que interage com a sociedade. Além disso, o artigo sugere que uma formação mais adequada dos professores nesse sentido poderia contribuir para uma prática pedagógica mais rica e reflexiva.

Diante do exposto, podemos concluir que uma análise conjunta dessas e até mesmo de outras pesquisas semelhantes revelam que a inclusão da História da Química é essencial para desmistificar a ciência e apresentá-la como um processo dinâmico e humano. No entanto, apesar de algumas melhorias, há uma lacuna na forma como essa história é apresentada nos livros didáticos, muitas vezes tratada como uma curiosidade opcional. É necessário desenvolver recursos educacionais que possam integrar efetivamente a história e filosofia da ciência, oferecendo aos estudantes uma compreensão mais rica e crítica do desenvolvimento científico

## 2.2 TEORIAS DE LIGAÇÕES QUÍMICAS

### 2.2.1 Aspectos históricos

As mais antigas explicações sobre interações entre os átomos, podem ser encontradas com os filósofos pré-socráticos Empédocles e Hipócrates, na Grécia antiga (séc. V a.C.). Esses filósofos atribuíam sentimentos como amor e ódio aos elementos, como se os átomos fossem seres humanos e acreditavam que a atração ou repulsão das substâncias estavam relacionadas a estes sentimentos. Já no período alquimista, acreditava-se que as interações dos elementos ocorriam pelas semelhanças entre eles e não porque possuíam sentimentos (JUSTI, 1998).

No século posterior, Aristóteles (séc. IV a.C.) também cita fatores que podem influenciar a ocorrência de transformações, evidenciando afinidades e diferenças entre as substâncias. Estas ideias sobre afinidade entre os átomos influenciaram o pensamento de muitos cientistas até o século XVII, passando pelo período da alquimia com certa atenção às transformações e formação de substâncias, mostrando alguns registros de que as substâncias não se combinavam devido a sentimentos, mas por causa de suas semelhanças (JUSTI, 1998).

No século XVIII, a química não tinha reconhecimento acadêmico na Europa, o que levou muitos químicos a se aproximarem de outras áreas da filosofia, como a mecânica e a astronomia. Os filósofos naturais da época acreditavam que as teorias precisavam ter embasamento experimental e explicações mecânicas ou matemáticas. Isaac Newton (1643-1727) foi influente, propondo que a matéria era composta por partículas com forças de atração e repulsão, mantendo-as ou não unidas. Muitos cientistas adotaram as ideias newtonianas, que apresentavam fundamentos mecânicos, mas não explicavam como as reações químicas ocorriam. Nesse contexto, os químicos da época começaram a aceitar explicações mecânicas para as propriedades das substâncias e reações, aproximando-se da física. Eles tentaram quantificar a força de afinidade ou atração, seguindo as ideias de Newton, mas sem modificar ou entender completamente as teorias existentes sobre essa força (JUSTI, 1998).

Em 1718, o francês Étienne François Geoffroy (1672-1731) apresentou uma tabela de afinidade, apesar de não utilizar este termo e preferir o uso de 'harmonia', classificando as reações pela capacidade das substâncias de unirem-se (JUSTI, 1998). A lei de Coulomb (1784) sugeriu um caráter elétrico para a ligação química através de seus experimentos (GILLESPIE; ROBINSON, 2007).

A expressão *ligação química* surgiu apenas na segunda metade do século XIX, contudo, desde a Antiguidade evidenciam-se ideias sobre a transformação da matéria. No século XVII, a ciência moderna já estava se distanciando das teorias clássicas e alquímicas, adotando ideias baseadas no mecanicismo e na experimentação controlada. Essa mudança foi impulsionada por uma nova concepção de causalidade, que favoreceu a interpretação dos fenômenos em termos de partículas constituintes. Ideias filosóficas clássicas, absorvidas e reinterpretadas pelos povos árabes, foram reintroduzidas no contexto intelectual europeu, influenciando esse desenvolvimento científico. (ABRANTES, 1998; BENSUADE-VINCENT; STENGERS, 1992).

As principais primeiras teorias de ligações químicas foram: a teoria eletroquímica da ligação química (ou teoria dualística, após a descoberta da eletricidade), a teoria positivo-negativa (após a descoberta do elétron) e a teoria da ligação de Lewis (teoria do par eletrônico).

Conhecimentos antigos da alquimia, principalmente os práticos, foram agregados à uma interpretação mecanicista da natureza, onde a existência de forças de atração atuando sobre os constituintes da matéria seriam responsáveis pelas transformações percebidas na natureza. A teoria ficou conhecida como Teoria de Afinidade Química, uma forma de explicar os fenômenos químicos que depois foi apoiada e reformulada por diferentes filósofos naturais, como Nicolas Lémery (1645-1715), Isaac Newton (1642-1727) e outros. As afinidades seriam as forças mecânicas que atuariam de forma análoga às forças gravitacionais. Enquanto forças gravitacionais explicaria a atração dos corpos celestes, a afinidade explicaria a atração dos corpos químicos (MOCELLIN, 2006).

Um outro aspecto importante é que a intensidade das forças de atração era definida qualitativamente e experimentalmente. Os dados obtidos foram sistematizados em tabelas organizadas por ordem decrescente de forças de atração, conhecidas como tabelas de afinidade. A ideia de afinidade fez parte da estrutura teórica da Química até o fim do século XIX, mas no início deste século, novas teorias e novos fenômenos explicariam melhor o problema da transformação química. Entre essas novidades, o surgimento da Eletroquímica e a teoria atômica de John Dalton, que propõe em seu *A New System of Chemical Philosophy* (1808), a ideia de que a matéria é formada por partículas indivisíveis de diferentes massas relativas, chamadas de átomos (BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).

A teoria atômica de Dalton marca o surgimento do que os historiadores chamam de *átomo químico*: o átomo químico não se refere somente à constituição dos corpos, mas também às transformações químicas. Dalton construiu um novo significado para o termo átomo, considerando-o não somente como o menor constituinte da matéria, mas também como as unidades mínimas participantes das reações químicas (BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).

Os conceitos de átomo e molécula, introduzidos por John Dalton (1766-1844) em 1808 e Amadeo Avogadro (1776-1856) em 1811, marcaram o início do desenvolvimento da química no século XIX, mas não foram prontamente compreendidos. Em 1860, o primeiro Congresso Mundial de Química em Karlsruhe, Alemanha, discutiu esses temas. Na época, o pensamento científico era influenciado pelas ideias de Isaac Newton, que buscavam descrever todos os sistemas do mundo através de fórmulas matemáticas e leis físicas. A lei de gravitação, as leis do

movimento e as forças de atração e de repulsão descreveriam o movimento dos objetos. Antoine Laurent Lavoisier (1743-1794) destacou-se na química por suas contribuições à teoria da combustão, lei da conservação da matéria, nomenclatura química e estudos sobre fermentação e respiração (BEZERRA; SILVA, 2001).

Além das descobertas de Lavoisier, John Dalton também estava ciente dos trabalhos de Joseph Priestley (1733-1804) e Henry Cavendish (1731-1810) sobre gases, e nas primeiras ideias de combinação química propostas por Joseph Proust (1754-1826), com sua lei das proporções definidas. Jeremias Richter (1762-1807) também influenciou Dalton ao determinar os equivalentes de ácidos e bases que se combinam em reações de neutralização. Na teoria atômica de Dalton, os compostos químicos formam-se pela combinação de dois ou mais elementos em um "átomo composto". Assim como Jeremias Richter, ele acreditava nas relações ponderais de combinação e adotava uma regra de simplicidade, propondo que, quando dois elementos formam um único composto, este é binário e consiste em um átomo de cada elemento. Se formarem dois compostos, um é binário e o outro ternário, com duas unidades de um elemento e uma do outro. Assim, a água, por exemplo, seria descrita como um composto binário de hidrogênio e oxigênio, com pesos relativos de 1 e 7, respectivamente (BEZERRA; SILVA, 2001).

As primeiras ideias de que as ligações químicas tinham natureza elétrica surgiram dos experimentos de William Nicholson (1753-1815) e Anthony Carlisle (1768-1840), que realizaram a eletrólise da água, conseguindo separá-la em hidrogênio e oxigênio. Em 1811, o químico sueco Jöns Jakob Berzelius (1779-1848) desenvolveu uma teoria de atração elétrica, sugerindo que cada átomo possuía um ou mais polos elétricos com cargas positivas e negativas em lados opostos, similares aos polos de um ímã. A atração entre átomos ocorria devido à neutralização das cargas elétricas opostas (BEZERRA; SILVA, 2001).

Foi com base nos fenômenos eletroquímicos e na teoria atômica de Dalton, que Berzelius propôs que a afinidade química não seria uma força mecânica, mas sim uma força de natureza elétrica. Berzelius organizou os elementos químicos conhecidos da época em dois grupos: os eletronegativos - aqueles atraídos pelo polo positivo de uma pilha voltaica, e os eletropositivos: atraídos pelo polo negativo de uma pilha voltaica. Sendo assim, para Berzelius, a afinidade química poderia ser entendida como a força

de atração entre um elemento eletronegativo e um elemento eletropositivo (BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).

### **2.2.2 A teoria eletroquímica da ligação química (teoria dualística)**

A construção da primeira "pilha" ou "bateria" elétrica e a descoberta da eletricidade pelo italiano por Alessandro Volta (1745-1827), em 1800, demonstrou que uma reação química entre diferentes átomos podia gerar uma corrente elétrica. O nome pilha era devido ao dispositivo ser constituído por discos de cobre e ferro empilhados (como numa pilha de moedas). Em Londres, William Nicholson e Anthony Carlisle mostraram rapidamente que a corrente elétrica podia decompor compostos em seus átomos, como fizeram com a água, descobrindo que era composta pelos gases hidrogênio e oxigênio. Em seguida, Humphry Davy (1778-1829) e J. J. Berzelius, na Suécia, utilizaram a eletrólise para isolar metais como sódio, cálcio, potássio, magnésio e bário, todos pela eletrólise de sais fundido. Os metais e o hidrogênio, que apareciam no polo negativo da pilha, foram classificados como positivamente carregados devido à sua atração pelo eletrodo negativo (BEZERRA; SILVA, 2001).

Em 1818, baseando-se nestas ideias, Berzelius desenvolveu a teoria eletroquímica da ligação (ou teoria dualística). Segundo ela, todos os átomos eram positivamente ou negativamente carregados. Os átomos positivos repeliam os positivos e os negativos repeliam os negativos. A combinação só ocorria entre átomos positivos e negativos. Assim, esta primeira teoria da ligação química foi inicialmente aceita por físicos e químicos e se ajustava perfeitamente aos compostos da química mineral (BEZERRA; SILVA, 2001).

Os que acreditavam na teoria de Berzelius não podiam admitir a existência de moléculas diatômicas, segundo o que foi proposto por Avogadro. Átomos de oxigênio e cloro, sendo negativamente carregados, se repeliriam e não seriam capazes de formar moléculas diatômicas de oxigênio e cloro, respectivamente, por exemplo (BEZERRA; SILVA, 2001).

### 2.2.3 A teoria positivo-negativa

Chegando na metade do século XIX, as teorias que sustentavam a atração elétrica entre os átomos diminuíram em popularidade entre os químicos. Dentre outras razões, o surgimento da química dos compostos de carbono ou química orgânica foi a principal. Os estudos sobre substâncias de origem animal ou vegetal aumentavam entre os químicos. Esses estudos continham somente a análise do número, tipo e arranjo dos átomos daquelas substâncias, que normalmente eram compostas de carbono, hidrogênio e oxigênio, mas não atentavam a força que mantinha os átomos unidos. Na metade do século XIX, o surgimento da indústria química na Alemanha fez com que a química orgânica obtivesse grande proeminência. Químicos alemães realizaram análises e sínteses de corantes, drogas e produtos petroquímicos sem levar em consideração nenhuma teoria elétrica de atração. Apenas uma simples linha representava a ligação entre os átomos nesses compostos. Assim, os químicos orgânicos evidenciaram uma fraqueza fundamental da teoria elétrica de atração, mostrando que nos compostos orgânicos o que mais prevalecia era a ligação entre dois átomos de carbono. Todos os átomos de carbono são semelhantes, então não haveria as cargas opostas para atraírem-se e ligarem-se (BEZERRA; SILVA, 2001).

O desenvolvimento da ideia de 'afinidade seletiva' surgiu com o químico escocês Archibald Scott Couper (1831-1892) em 1850. Couper começou a distinguir entre 'graus de afinidade', uma característica de um elemento capaz de se combinar com outro em várias proporções e 'afinidade seletiva', a afinidade de um dado elemento por vários outros. Essa distinção foi importante no desenvolvimento da ideia de valência (JUSTI, 1998). Couper também convencionou pela primeira vez o traço entre os átomos representando uma ligação química, em 1858. Logo depois, em 1861, o químico orgânico escocês Alexander Crum-Brown (1838-1922) também se utilizou da mesma representação que, quimicamente falando a ligação química não é real, é apenas a expressão de uma ideia da união entre os átomos (GILLESPIE e ROBINSON, 2007).

Em 1881, Hermann von Helmholtz (1821-1894) convidava os químicos dessa época para retornar às ideias iniciais de Berzelius, que sugeriam uma identidade entre as forças de atração e eletricidade. Nesse ínterim, o químico sueco Svante Arrhenius (1859-1927), garantia que suas experiências eletrolíticas com soluções aquosas

também apontavam que as forças atrativas entre os átomos eram de natureza elétrica. Porém, apesar dos argumentos razoáveis de Arrhenius e Helmholtz, as evidências conclusivas sobre a função desempenhada pelas cargas elétricas na união dos átomos eram escassas e insuficientes (BEZERRA; SILVA, 2001).

As primeiras teorias da química orgânica procuravam explicar e organizar os compostos de carbono conhecidos, como foi o caso da Teoria dos Tipos, uma das teorias que surgiram nessa época. Nela, as substâncias orgânicas eram agrupadas a partir de “tipos” de moléculas mais simples, as quais supunham originar moléculas mais complexas através de reações de substituição (BENFEY, 1992).

Em 1852, o químico inglês Edward Frankland (1825-1899) tentou isolar o radical etil através de reações entre haletos de alquila e metais. Apesar de falhar em seu objetivo inicial, Frankland percebeu que alguns átomos preservava uma quantidade fixa, ou um limite de combinação, com alguns radicais. Com isso, Frankland propôs a ideia de *poder de combinação*, que viria originar a ideia de valência (BENFEY, 1992).

A força ou capacidade de combinação proposta por Frankland foi renomeada pelo químico August Wilhelm von Hofmann (1818-1892) como *quantivalência*, termo do qual adviria o termo *valência* (CAMEL; KOEHLER; FILGUEIRAS, 2009).

Químicos como Friedrich August Kekulé (1829-1896), Alexander Butlerov (1828-1886) e Archibald Couper (1831-1892), dedicaram-se a elucidar o problema da conexão entre os átomos usando as ideias de valência e estrutura química, assim como uma abordagem atomista, o que se distanciava da abordagem equivalentista assumida por Frankland (CAMEL; KOEHLER; FILGUEIRAS, 2009; BENFEY, 1992).

Kekulé se tornou importante na química orgânica na Alemanha do século XIX, principalmente após seus trabalhos envolvendo a determinação da estrutura química de moléculas orgânicas, em especial, a do benzeno (ROCKE, 2015). Para Benfey (1992, p. 70), a posição proeminente de Kekulé entre os químicos da época colaborou para que ele fosse reconhecido como autor do conceito, a despeito dos trabalhos de Frankland, além de do fato de Frankland ter baseado suas ideias na antiga teoria de equivalentes e não ter projetado a valência como uma propriedade intrínseca ao elemento químico. O russo Alexander Butlerov foi o primeiro a utilizar a expressão *ligação química*. O termo *ligação* é encontrado nas obras de Butlerov em artigo

publicado em 1861, contudo, a ideia de ligação química foi apresentada dois anos depois, em um artigo de 1863 publicado no *Zeitschrift für Chemie und Pharmacie*. Já em 1866, Frankland publicou um artigo apresentando outra definição para ligação química, aonde a associava ao número de vezes que um elemento se combina com outro, diferenciando-se de outros termos como afinidade química, atomicidade, força atômica e equivalência (PENHA; SILVA, 2011).

Em 1891, Alfred Werner (1866-1919) desenvolveu o que ficou conhecida como “teoria da coordenação” e explicou o comportamento e a estrutura daquilo que ele chamava de compostos moleculares ou complexos. Foi essa teoria que introduziu os conceitos de valência primária e secundária, número de coordenação, compostos de adição e compostos de intercalação dentro da Química. Para propor sua teoria, Werner utilizou os resultados das experiências eletrolíticas de Arrhenius e as características que os compostos moleculares tinham que os identificavam também com os compostos orgânicos (a atividade ótica, por exemplo) (BEZERRA; SILVA, 2001).

Em 1897, Joseph John Thomson (1856-1940), físico que dirigiu o importante laboratório Cavendish na Universidade de Cambridge, na Inglaterra, apresentou em sua pesquisa a presença de partículas negativas nos átomos - os elétrons. Na teoria proposta por Thomson, o elétron seria o responsável pela atração elétrica entre os átomos. Thomson afirmava que a atração entre dois átomos resultava sempre que um dos átomos doava um elétron para o outro. Assim, o átomo que recebeu o elétron ficaria negativamente carregado e o átomo que perdeu o elétron ficaria com uma carga resultante positiva. Então, os dois átomos teriam cargas opostas e se atraíam. Em 1903, Johannes Stark (1874-1957) sugestionou que a união entre átomos seria resultado do compartilhamento de um elétron por um par de átomos em uma molécula. Ele representou esse compartilhamento com linhas de força elétrica indo do elétron para cada um dos átomos ligados. O elétron seria ligado com um grande número de linhas ao átomo mais eletronegativo e com um número menor de linhas ao átomo mais eletropositivo (BEZERRA; SILVA, 2001).

Em 1904, na Alemanha, o químico Richard Abegg (1869-1910) desenvolveu, uma teoria eletrostática para a ligação química idêntica à de Thomson. Porém, sua “regra do octeto” trazia indicação do número máximo de elétrons envolvidos em uma ligação. Abegg verificou que um mesmo átomo tinha carga positiva ou carga negativa



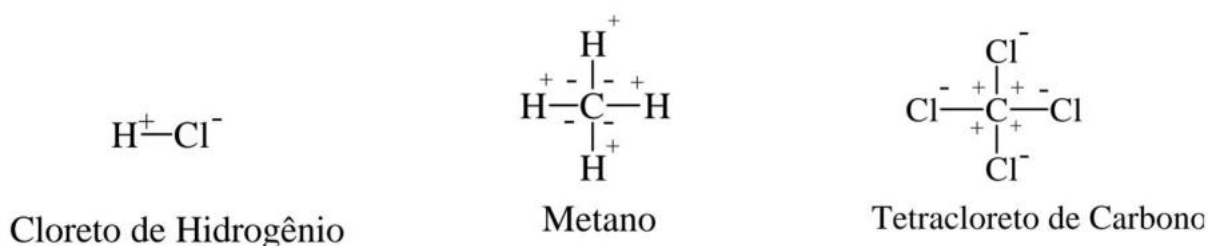
em diferentes compostos e que o somatório do módulo destas cargas muitas vezes era oito. Exemplo: cloro com carga -1 no cloreto de sódio (NaCl) e carga +7 no ácido perclórico (HClO<sub>4</sub>); o somatório do módulo das cargas igual a oito. A regra de Abegg obteve grande popularidade entre os físico-químicos (BEZERRA; SILVA, 2001).

Do lado oposto da nova química teórica (ou físico-química), estavam algumas pessoas de grande valor para a Química. William Thomson (1824-1907), conhecido como Lord Kelvin, por exemplo, recusava-se a aceitar que as interações entre átomos eram de natureza elétrica. Ele concordava com a lei da força de Boscovitchian, proposta por Roger Joseph Boscovitch (1711-1787) e acreditava que os átomos eram pontos (ou centros idênticos) que se comportavam de acordo com uma lei oscilatória a qual a força entre os átomos variava com a distância, oscilando em ora atrativa ora repulsiva. Já nos Estados Unidos, químicos como Edgar Fahs Smith (1856-1928), da Universidade da Pensilvânia, e Louis Kahlenberg (1870-1941), da Universidade de Wisconsin, também se revelavam céticos em relação às teorias eletrônicas. Além desses, diversos cientistas não concordavam com a ideia de átomo proposta por Dalton, dentre eles, o químico e filósofo alemão, nascido na Letônia, Wilhelm Ostwald (1853-1932), chegando a publicar um manual de química que não continha a teoria atômica (BEZERRA; SILVA, 2001).

Diversos químicos concordavam com a ideia de Thomson de que uma ligação entre dois átomos ocorria quando um dos átomos doava um elétron ao outro. Essa teoria era frequentemente chamada de teoria positivo-negativa (pois como resultado da combinação de átomos, cada um passava a conter uma carga positiva ou negativa). Ela funcionava muitíssimo bem para a maioria dos compostos inorgânicos ou polares, como os resultantes da combinação de um metal com um não-metal (BEZERRA; SILVA, 2001).

Através da eletrólise com compostos iônicos, os químicos demonstraram experimentalmente a existência de átomos com carga positiva e átomos com carga negativa, parecendo verificado o postulado fundamental da teoria. Entretanto, a aplicação da teoria positivo-negativa para compostos orgânicos, ou para compostos apolares, trazia sérias dificuldades (Figura 1). Átomos com cargas positivas e negativas deveriam existir nesses compostos, mas todas as tentativas para comprovar essa presença foram falhas (BEZERRA; SILVA, 2001).

**Figura 1** – Exemplos de estruturas eletrônicas de acordo com a teoria positivo-negativa.



Fonte: (BEZERRA; SILVA, 2001).

#### 2.2.4 A teoria da ligação de Lewis (teoria do par eletrônico)

Os trabalhos de Thomson sobre os chamados raios catódicos, os experimentos sobre movimento browniano de Einstein e a determinação da constante de Avogadro por Jean Perrin (1870-1942) estão entre as pesquisas científicas que contribuíram pela aceitação do atomismo no início do XX (PEREIRA; SILVA, 2018).

Químicos como William Ramsay (1852-1916) e Richard Abegg (1869-1910), e os físicos Paul Drude (1863-1906) e Hendrik Lorentz (1853-1928), propuseram que os elétrons desempenham um papel crucial na formação de ligações e na estabilidade dos átomos (IHDE, 1984; PENHA; SILVA, 2011). Entre 1900 e 1906, Drude e Lorentz desenvolveram um modelo de ligação, utilizando a ideia de elétrons fracamente ligados aos átomos dos metais, baseando-se na teoria cinética dos gases (PENHA; SILVA, 2011). Esse modelo, conhecido como "gás de elétrons", explicou propriedades metálicas como condutividade à temperatura ambiente, brilho e maleabilidade. No entanto, ele falhou em explicar a capacidade térmica e a dependência entre temperatura e condutividade elétrica.

Perto de 1910, com os estudos de J. J. Thomson, na Inglaterra; de Richard Abegg, na Alemanha; e de um grupo de físico-químicos destacados do Instituto de Tecnologia de Massachusetts, o qual fazia parte Gilbert Newton Lewis (1875-1946), químicos e físicos chegaram às seguintes conclusões para todos os corpos:

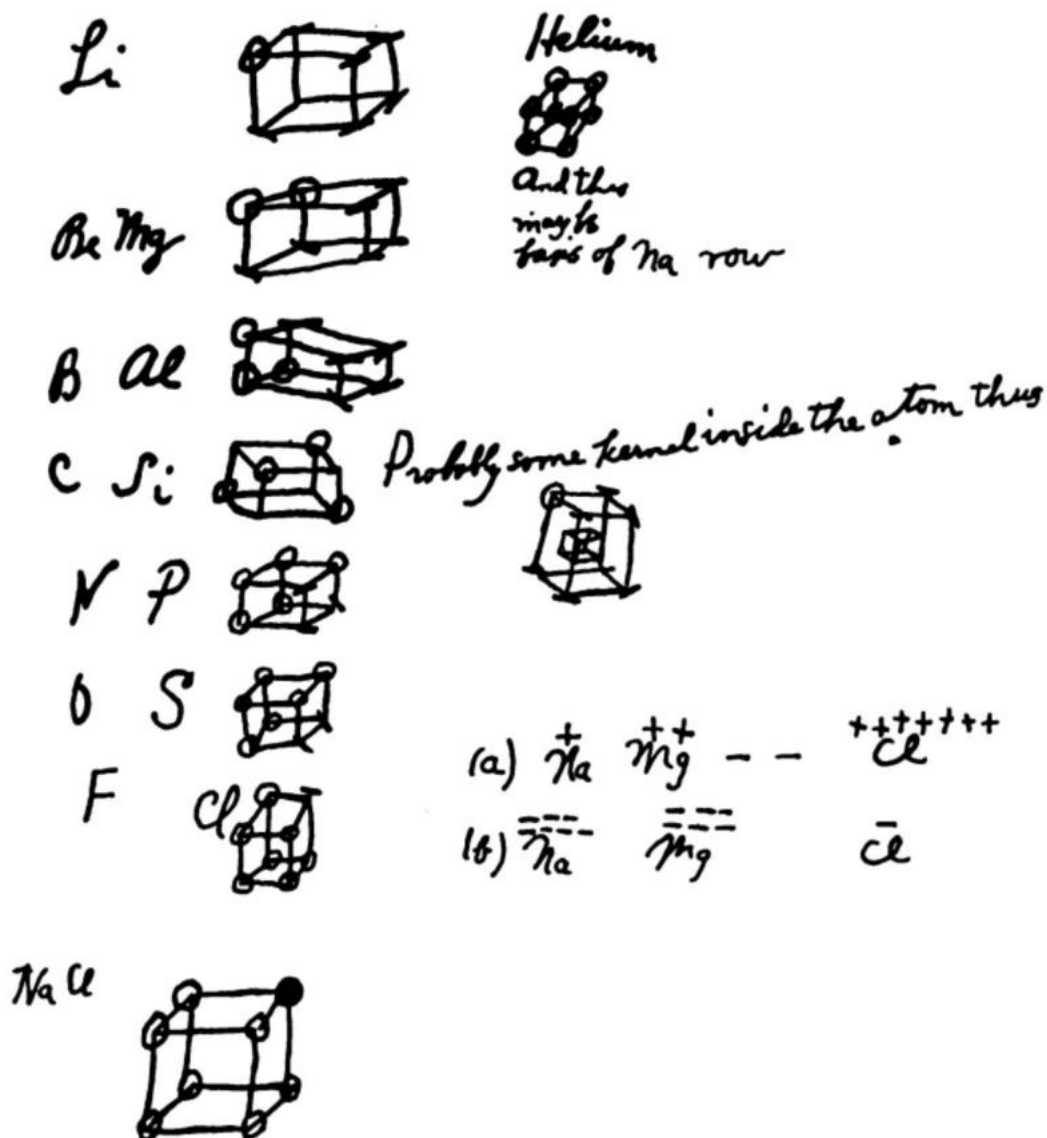
- São formados por átomos que contêm partículas menores. Portanto, os átomos podem ser divididos;
- Todos os átomos possuem um ou mais elétrons. O elétron é uma partícula com peso muitíssimo pequeno e carregada negativamente;
- Todo átomo possui uma segunda partícula, consideravelmente mais pesada que o elétron e que responde pela maior parte da massa do átomo, possuindo carga positiva suficiente para contrabalançar a carga negativa dos elétrons;
- A transferência de elétrons produziria a força atrativa necessária para manter os átomos juntos.

(BEZERRA; SILVA, 2001).

O modelo atômico proposto por Niels Henrik David Bohr (1885-1962), modelo “planetário”, em 1913, considerava estas conclusões e proporcionou debates entre físicos e químicos: como se explicaria o espectro atômico? Como a estabilidade do átomo seria determinada em um átomo dinâmico?

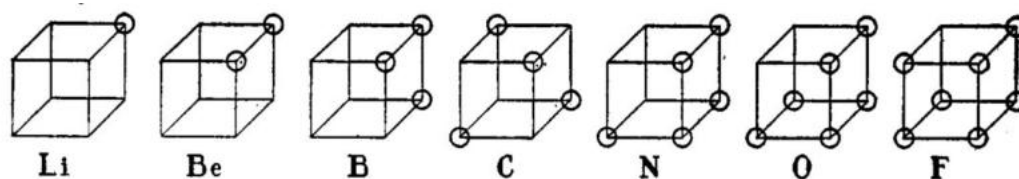
É válido ressaltar que, em 1902, antes de discutir a natureza da ligação química, Lewis propôs um modelo de átomo chamado “átomo cúbico”, como mostra a Figura 2. Já a Figura 3, mostra a figura dos “átomos cúbicos” de Lewis publicada em 1916.

**Figura 2** – O nascimento da ideia do “átomo cúbico”. Manuscrito de Lewis de 28 de março de 1902, reproduzidos em seu livro "Valence and the Structure of Atoms and Molecules", de 1923.



Fonte: (LEWIS, 1923).

**Figura 3** – Os “átomos cúbicos” de Lewis.



Fonte: (LEWIS, 1916).

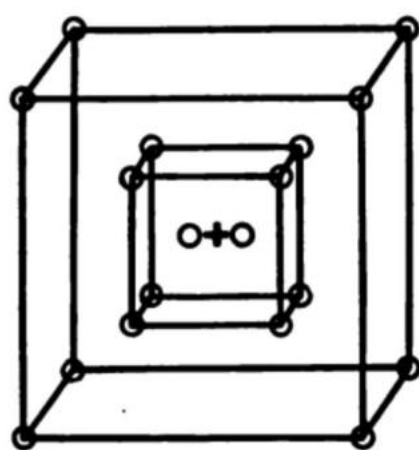
Contudo, somente em 1916, Lewis e também o cientista alemão Walther Kossel (1888-1956) propuseram novas teorias de ligação química independentemente. Os

dois se basearam nas ideias de Richard Abbeg sobre a relação entre os elétrons e a valência dos átomos. Segundo Abbeg, existiam a valência positiva (o número de elétrons negativos frouxamente conectados no átomo) e a valência negativa (a capacidade de um átomo remover ou atrair um certo número de elétrons de um outro átomo (DRUDE, 1904 apud LAIDLER, 1993). Para Abbeg, todos os átomos tinham valências negativas e positivas, e a soma destas seria igual a oito (LAIDLER, 1993).

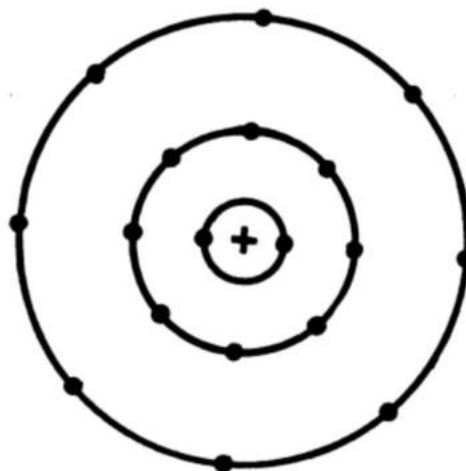
Kossel, baseando-se nessas ideias, propôs a chamada teoria das ligações polares, onde uma ligação química ocorreria devido à transferência de elétrons entre dois átomos, resultando em uma atração eletrostática entre eles (LAIDLER, 1993). Já Lewis, inspirado pelo trabalho de Abbeg, no mesmo ano, propôs que a ligação química deveria ser compreendida como a transferência ou compartilhamento de elétrons entre dois átomos, resultando em uma configuração eletrônica semelhante à de um gás nobre, com oito elétrons ao redor do núcleo atômico (COFFEY, 2008; IHDE, 1984).

Lewis e Kossel também foram inspirados pelas formas de representação dos átomos comuns na época, como mostra a Figura 4. Kossel utilizou a representação planetária, semelhante à utilizada por Bohr, para elucidar sua teoria de ligação. Já Lewis apresentou o modelo do “átomo cúbico”, no qual os elétrons ocupam os vértices de um cubo imaginário em torno do núcleo atômico, para explicar a valência e formação das ligações (IHDE, 1984).

**Figura 4** – Visões de Kossel e Lewis para o átomo de carbono em 1916. O cubo menor (Lewis) é composto pelos elétrons do nível mais interno e também pelo núcleo do átomo.



Lewis, 1916



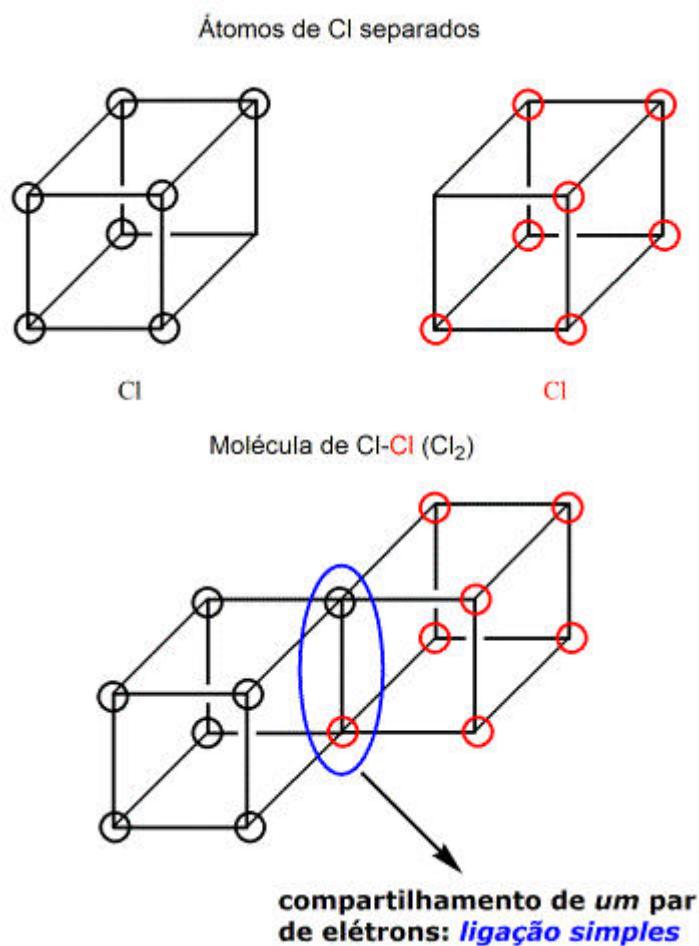
Kossel, 1916

Fonte: (LEWIS, 1923).

Para Lewis, a ligação química ocorreria através do compartilhamento de elétrons ao se aproximarem os átomos cúbicos em relação aos seus vértices, arestas e faces. Ao compartilharem elétrons, os átomos deveriam adquirir a configuração eletrônica de um gás nobre (oito elétrons de valência). Usando esse modelo, Lewis tentou explicar as ligações químicas e também a disposição espacial dos átomos nas moléculas (LAIDLER, 1993).

Na mesma publicação de 1916, Lewis demonstrou como ocorre a ligação das moléculas do  $\text{Cl}_2$ , onde somente os cubos externos são mostrados, pois são os elétrons de valência que determinam as ligações, completando sua camada externa com oito. A Figura 5 mostra a estrutura química proposta por Lewis em sua publicação de 1916 para o gás cloro ( $\text{Cl}_2$ ).

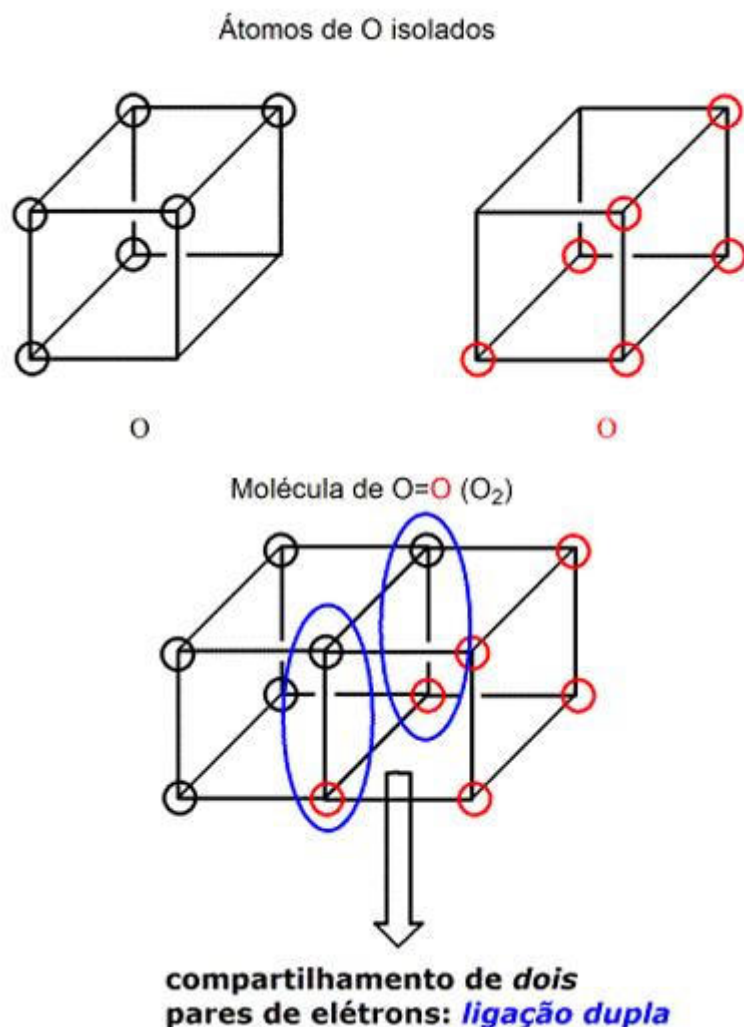
**Figura 5** – Estrutura química proposta por Lewis (1916) para o gás  $\text{Cl}_2$ . Apenas os elétrons de valência estão sendo mostrados.



Fonte: <https://www.profpc.com.br/Liga%C3%A7%C3%B5es%20Qu%C3%ADmicas/Aula2.htm>

Já a Figura 6, mostra a proposta de Lewis para a ligação da molécula de gás oxigênio ( $\text{O}_2$ ), onde ocorre o compartilhamento de dois elétrons de valência, na mesma publicação de 1916. Este é um exemplo de uma ligação dupla entre os átomos.

**Figura 6** – Estrutura química proposta por Lewis (1916) para a molécula de  $O_2$ .  
Apenas os elétrons de valência estão sendo mostrados.



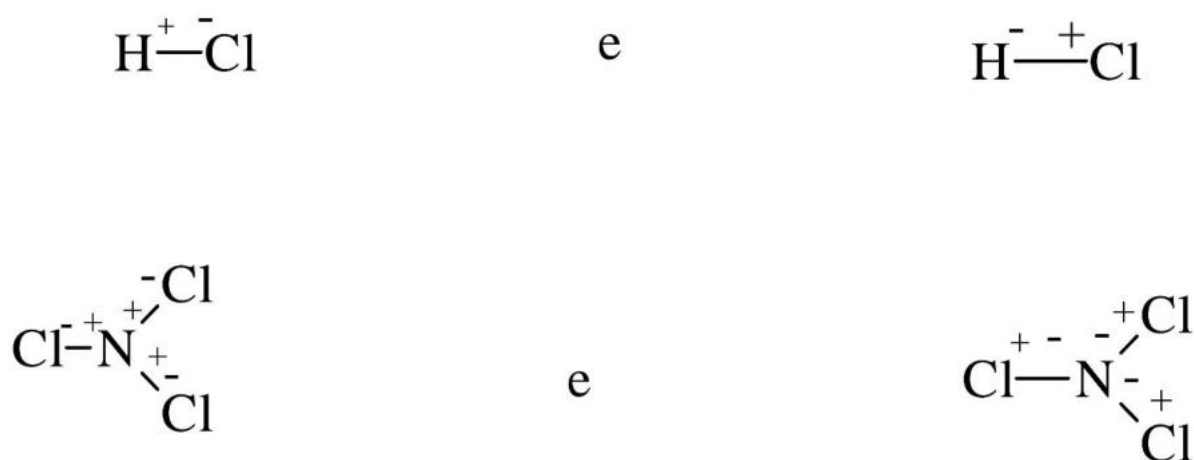
Fonte: <https://www.profpc.com.br/Liga%C3%A7%C3%B5es%20Qu%C3%ADmicas/Aula2.htm>

Adentrando um pouco mais na história da teoria proposta por Lewis, temos o químico analítico e orgânico estadunidense William Albert Noyes (1857-1941), que tentou durante 20 anos isolar os átomos dos compostos orgânicos ou compostos apolares, aplicando teoria positivo-negativa, antes de abandonar a pesquisa em 1921. Então, o químico Harry Fry sugeriu novos tipos de compostos elétricos, chamados eletrômeros, cujos átomos tinham o mesmo arranjo estrutural e cargas elétricas opostas (Figura 7), a partir dos quais Harry Fry afirmava provar a existência de átomos carregados em compostos orgânicos, ou apolares. Julius Oscar Stieglitz, químico estadunidense, inferia que os átomos carregados em compostos orgânicos eram diferentes daqueles dos compostos inorgânicos e não podiam ser isolados. Contudo,



as evidências eram muito fortes e pertinentes contra a teoria positivo-negativa, quando era aplicada aos compostos orgânicos e até mesmo a certos compostos inorgânicos, que os químicos e físicos tinham demonstrado não consistir de átomos carregados (BEZERRA, SILVA, 2001).

**Figura 7** – Eletrômeros de cloreto de hidrogênio (HCl) e de tricloreto de nitrogênio (NCl<sub>3</sub>).



**Fonte:** (BEZERRA; SILVA, 2001).

Gilbert Newton Lewis, Stuart Bates (1887-1961) e Roger Brunel (1881-1924) resumiram essas evidências em suas publicações sobre a ligação química. Eles mostraram que, geralmente, compostos polares liberavam seus átomos carregados em solução e eram eletrólitos, já os compostos apolares não eram eletrólitos. Os compostos polares, quando comparados com os apolares, tinham altas constantes dielétricas, grandes momentos de dipolo e capacidades indutivas específicas altas. Eles também afirmavam que as diferenças entre as duas classes de compostos eram muito significativas nos comportamentos físicos e químicos, assim, não se poderia possivelmente requerer qualquer similaridade em suas estruturas elétricas (BEZERRA, SILVA, 2001).

Contudo, a teoria proposta por Lewis em 1916 foi a primeira teoria alternativa bem-sucedida sobre a função dos elétrons na formação de uma ligação química apolar. Na teoria de Lewis sobre a ligação química, ele assumiu que em vez do elétron ser transferido completamente, como na teoria positivo-negativa, ocorria apenas uma transferência parcial, incompleta do elétron. Sendo assim, os átomos compartilhavam

um par de elétrons entre si. A teoria de Lewis era mais ampla do que a teoria positivo-negativa, pois poderia ser aplicada eficientemente a compostos apolares, os quais não havia nenhuma indicação de formação de cargas nos átomos. Lewis afirmava que sua teoria também poderia ser aplicada para explicar a formação de ligações em compostos polares, havendo uma certa carga residual. Para esse caso, em cada ligação formada, o par de elétrons ficaria mais próximo do átomo que possui maior força de atração. Assim, este átomo ficaria aparentemente negativo e o outro pareceria positivo (Figura 8). Dessa forma, a teoria positivo-negativa seria somente um caso especial da teoria de Lewis, que seria uma teoria mais completa (BEZERRA, SILVA, 2001).

**Figura 8** – Estruturas eletrônicas de acordo com a teoria positivo-negativa (a) e de acordo com a teoria de Lewis (b).



**Fonte:** (BEZERRA; SILVA, 2001).

Segundo a teoria de Lewis, a razão de serem necessários dois elétrons para formar uma ligação química era consequência direta do modelo atômico estático adotado por ele. Em 1916, os químicos reconheceram que muitos compostos possuíam um número par de elétrons externos (elétrons de valência). A tabela 1 lista alguns exemplos.

**Tabela 1** – Alguns exemplos do número de elétrons de valência em átomos e moléculas.

<b>Número de elétrons de valência em um átomo</b>	<b>Número de elétrons de valência na molécula</b>
N = 5; H = 1	CH <sub>4</sub> = 8
C = 4; H = 1	CH <sub>4</sub> = 8
C = 4; O = 6	CO <sub>2</sub> = 16
S = 6; O = 6	SO <sub>3</sub> = 24
C = 4; Cl = 7	CCl <sub>4</sub> = 32

Fonte: (BEZERRA; SILVA, 2001).

Lewis mostrou que poderia aplicar as suas estruturas se os átomos combinantes compartilhassem dois elétrons, formando uma ligação química. A grande novidade na sua teoria era o par eletrônico, sendo o emparelhamento dos elétrons o fenômeno fundamental em uma ligação química. Os elétrons emparelhados não se repeliriam, conforme o previsto pela lei de Coulomb. Outro aspecto importante da teoria de Lewis era que as camadas eletrônicas, diferentemente da teoria de Bohr, davam ênfase às órbitas. Isso permitiu explicar a estrutura e a estereoquímica dos compostos, o que não era possível com o modelo proposto por Bohr. A teoria de Lewis forneceu uma ideia satisfatória sobre o arranjo eletrônico em muitos compostos, resolveu muitos outros problemas estruturais, como o do cloreto de amônio e o dos oxiácidos, além de prever corretamente as estruturas de uma recente classe de compostos, os hidretos metálicos. Ademais, também possibilitou a criação de um revolucionário conceito para ácidos e bases. A sua teoria admitia a existência de substâncias com elétrons desemparelhados, o que permitiu a explicação do paramagnetismo do gás oxigênio, por exemplo (BEZERRA, SILVA, 2001).

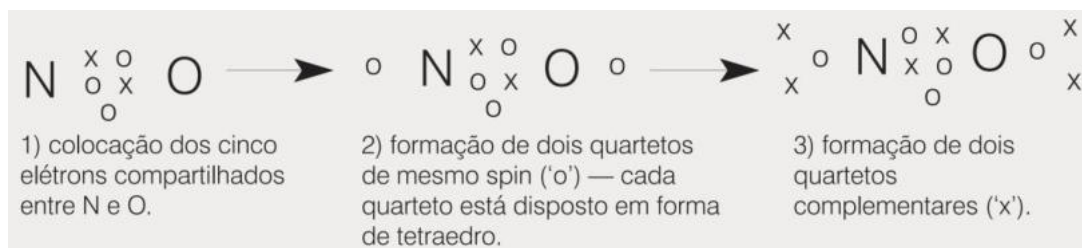
Um novo simbolismo eletrônico para representar as estruturas dos compostos foi proposto por Lewis: as fórmulas de Lewis. Na Inglaterra, Nevil Sidgwick (1873-1952) aplicou a teoria de Lewis para explicar a estrutura dos compostos de coordenação. Contudo, o grande expoente da teoria de Lewis foi Irving Langmuir (1881-1967), pesquisador da Companhia General Electric. Ele disseminou as ideias de Lewis, exaustivamente, por meio de muitas publicações. Por isso, em alguns casos a teoria de Lewis é chamada de teoria de Langmuir (BEZERRA, SILVA, 2001). Langmuir é considerado um dos cocriadores da teoria do compartilhamento de elétrons de Lewis. Além de popularizar o trabalho de Lewis, ele propôs uma nova abordagem para o problema da ligação química, propondo uma forma de prever

matematicamente o número de ligações covalentes de cada molécula através da equação:  $e = 8n - 2p$ ; onde “e” representa o número de elétrons de valência dos átomos constituintes, “n” representa o número de octetos e “p” o número de pares de elétrons compartilhados, ou seja, de ligações covalentes (KOHLE, 1974).

John Wilfrid Linnett (1913-1975) ampliou o modelo de Lewis de forma a assimilar o Princípio de Pauli. Conforme descrito por Luder (1967), o par de elétrons deve ser representado por dois elétrons de spins opostos, e o octeto passa a ser constituído por dois quartetos de elétrons, que são diferenciados pelos spins. No modelo de Lewis os elétrons são representados da mesma forma (‘o’, por exemplo), já no modelo de Linnett os diferentes spins são representados por símbolos distintos (‘o’ e ‘x’, por exemplo). Seguindo a distribuição cúbica, os elétrons de mesmo spin ficam dispostos segundo os vértices de um tetraedro, aumentando ao máximo a distância entre eles, minimizando a repulsão. O resultado leva a dois tetraedros geminados, formando um cubo. Assim, dois elétrons de spins opostos ficam unidos pela aresta do cubo separado por uma distância menor que a observada entre dois elétrons de mesmo spin. A utilização dos quartetos duplos preserva a simplicidade do octeto e permite a colocação dos spins, possibilitando tratar de propriedades magnéticas e de ordens de ligação fracionárias, diferente do que acontece com o modelo de Lewis (TOMA, 1997).

Um bom exemplo onde seria necessário o uso de quartetos duplos é o da molécula de NO. Com 11 elétrons de valência no total, seria necessário compartilhar cinco elétrons entre os dois átomos. Portanto, não seria possível construir uma estrutura de Lewis com octetos completos. Porém, na teoria dos quartetos duplos, basta compartilhar três elétrons de mesmo spin (‘o’) e dois de spins contrários (‘x’). Com isso, a montagem da estrutura de Linnett poderia ser feita como explicado na Figura 9 abaixo (TOMA, 1997).

**Figura 9** – Estruturas eletrônicas segundo o modelo de Linnet.



**Fonte:** (TOMA, 1997).

Na representação espacial da distribuição eletrônica, cada quarteto de elétrons está disposto em forma de tetraedro. No exemplo acima, a molécula apresenta uma ordem de ligação fracionária igual a 2,5, havendo no balanço global um elétron desemparelhado, o que é compatível com o caráter paramagnético observado experimentalmente (TOMA, 1997).

### 2.2.5 Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons Livres (modelo VSEPR)

Até 1920, a teoria de Lewis para a ligação química, que foi baseada no par eletrônico teve os seus fundamentos qualitativos muito bem estabelecidos. Contudo, faltava uma base teórica que lhe desse uma sustentação maior. A base dessa sustentação começou com o princípio da exclusão de Pauli (Wolfgang Pauli, 1900-1958), anunciado em 1925. Segundo este princípio, dois elétrons em um átomo não podem ter valores idênticos para os quatro números quânticos. Este princípio estava de acordo com a proposta anterior feita por Lewis, onde a ligação covalente consistia no emparelhamento de dois elétrons em idênticos estados de energia, exceto para os spins, que seriam opostos ou emparelhados. O segundo passo surgiu em 1927 com o tratamento mecânico-quântico desenvolvido por Erwin Schrödinger (1877-1961). Walther Heitler (1904-1981) e Fritz London (1900-1954) aplicaram o tratamento mecânico-quântico com sucesso para a molécula de hidrogênio ( $H_2$ ) e esse modelo estabeleceu definitivamente as bases das ligações químicas por pares de elétrons (BEZERRA; SILVA, 2001).

A aplicação da mecânica quântica no estudo das ligações em diferentes tipos de compostos covalentes foi feita com sucesso por Linus Pauling (1901-1994). As contribuições de Pauling para o entendimento da natureza das ligações químicas



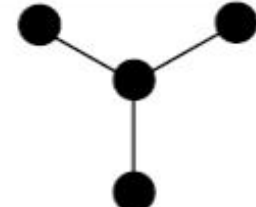
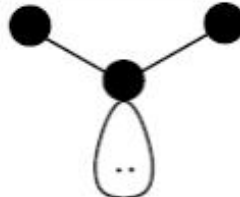
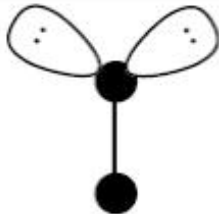
estão em muitos livros didáticos, como os conceitos de eletronegatividade, teoria da ligação de valência e a teoria dos orbitais híbridos (BEZERRA; SILVA, 2001).

Em 1940, o químico inglês Nevil Sidgwick (1873-1952) e o químico Hebert Marcus Powell (1906-1991) fizeram uma revisão sobre as estruturas das moléculas conhecidas até o momento e sugeriram que a geometria poderia ser prevista através do número de pares de elétrons na camada de valência do átomo central. Em 1957, o químico britânico Ronald James Gillespie (1924-2021) e o químico australiano Ronald Nyholm (1917-1971) repensaram a Teoria de Sidgwick e Powell, para a previsão das estruturas moleculares e dos ângulos de ligação e desenvolveram a VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory) (KOTZ, 2005).

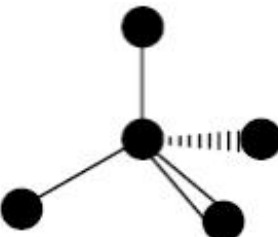
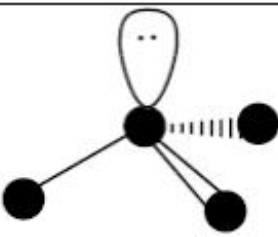
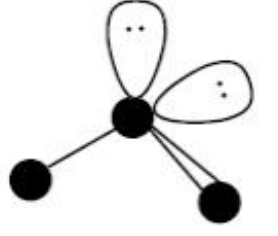
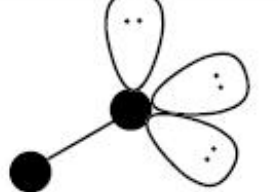
A VSEPR busca determinar qual a orientação mais estável dos pares eletrônicos em volta do um átomo central em uma molécula, prevendo a sua geometria. Segundo a teoria, os pares de elétrons da camada de valência (que estão carregados negativamente), permanecem separados, diminuindo as energias de repulsões existentes. A VSEPR ampliou a teoria da ligação química de Lewis e acrescentou as regras para explicar os ângulos de ligação entre o átomo central e os átomos ligantes. Para explicar melhor a VSEPR, podemos determinar as geometrias moleculares utilizamos o modelo geral  $AX_nE_m$  para a identificação do átomo central, dos pares isolados e os átomos ligantes. A letra A representa o átomo central, a letra X representa o átomo ligante, a letra E um par isolado, já n e m são os índices que representam a quantidade de cada ligante e par isolado. Exemplo: a molécula do cloreto de berílio ( $BeCl_2$ ), que contém um átomo central, dois átomos ligados e nenhum par isolado, sendo assim uma espécie do tipo  $AX_2$ . (KOTZ, 2005).

Em alguns casos, como na molécula da amônia ( $NH_3$ ), espécie do tipo  $AX_3E$ , temos quatro pares de elétrons ligados ao átomo central de nitrogênio, e esperava-se que a geometria fosse do tipo tetraédrico, no entanto a geometria molecular descrita é pirâmide trigonal, pois a geometria molecular é o arranjo dos espaços do átomo central e dos átomos ligados diretamente a ele, ou seja, os pares isolados devem ser considerados mesmo não sendo incluído na descrição da forma da molécula ou do íon. A tabela 2 lista os tipos de geometria dos pares de elétrons e a geometria da molécula de acordo com a quantidade de átomos e pares de elétrons livres ligados ao átomo central.

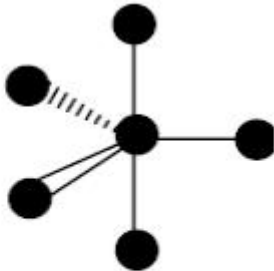
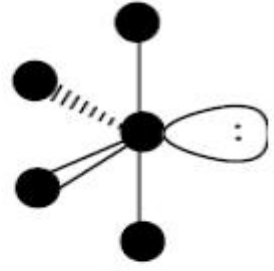
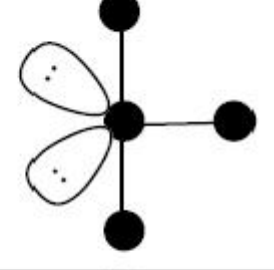
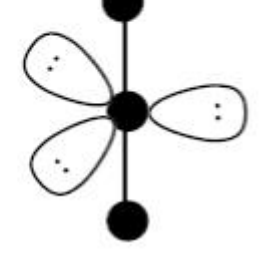
**Tabela 2** – Tipos de geometria dos pares de elétrons e a geometria da molécula.

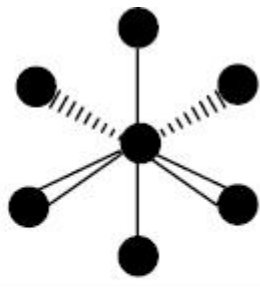
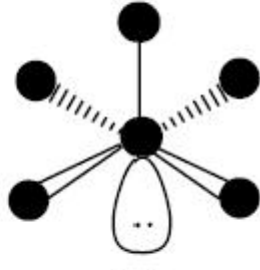
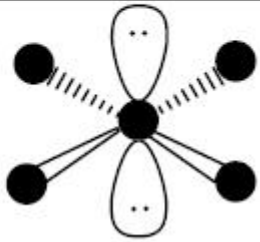
Número total de pares de elétrons em torno do átomo central	Número de Pares Isolados	Geometria dos pares de elétrons	Geometria da molécula	Representação
2	0	Linear	Linear	
	1	Linear	Linear	
3	0	Trigonal Planar	Trigonal Planar	
	1	Trigonal Planar	Angular	
	2	Trigonal Planar	Linear	

4

0	Tetraédrica	Tetraédrica	 A central black dot is bonded to four other black dots in a tetrahedral arrangement. One bond is vertical, one is horizontal to the left, one is diagonal down-left, and one is diagonal down-right. The diagonal down-right bond is represented by a dashed line.
1	Tetraédrica	Piramidal	 A central black dot is bonded to three other black dots in a pyramidal arrangement. One bond is vertical, one is horizontal to the left, and one is diagonal down-right. The diagonal down-right bond is represented by a dashed line. A lone pair is shown as two dots in a lobe above the central atom.
2	Tetraédrica	Angular	 A central black dot is bonded to two other black dots in an angular arrangement. One bond is horizontal to the left, and one is diagonal down-right. Two lone pairs are shown as two dots in a lobe above the central atom and two dots in a lobe to the right of the central atom.
3	Tetraédrica	Linear	 A central black dot is bonded to two other black dots in a linear arrangement. One bond is horizontal to the left, and one is vertical. Two lone pairs are shown as two dots in a lobe above the central atom and two dots in a lobe to the right of the central atom.



5	0	Bipirâmide trigonal	Bipirâmide trigonal	
	1	Bipirâmide trigonal	Gangorra	
	2	Bipirâmide trigonal	Forma "T"	
	3	Bipirâmide trigonal	Linear	

6	0	Octaedro	Octaedro	
	1	Octaedro	Pirâmide da base quadrada	
	2	Octaedro	Quadrado planar	

**Fonte:**

[https://www.profpc.com.br/Resumos%20de%20Qu%C3%ADmica/Qu%C3%ADmica%20Geral/Geometria%20Molecular/Geometria\\_molecular.htm](https://www.profpc.com.br/Resumos%20de%20Qu%C3%ADmica/Qu%C3%ADmica%20Geral/Geometria%20Molecular/Geometria_molecular.htm)

Já na tabela 3, temos os tipos de geometria molecular e a hibridização associada a elas.

**Tabela 3** – Tipos de geometria molecular e hibridização associada.

Tipo de Molécula ou Íon	Forma Geométrica	Hibridização Associada
AX <sub>2</sub>	Linear	sp
AX <sub>3</sub>	Trigonal Plana	sp <sup>2</sup>
AX <sub>2</sub> E	Angular	sp <sup>2</sup>
AX <sub>4</sub>	Tetraédrica	sp <sup>3</sup>
AX <sub>3</sub> E	Piramidal	sp <sup>3</sup>
AX <sub>2</sub> E <sub>2</sub>	Angular	sp <sup>3</sup>
AX <sub>5</sub>	Bipiramidal Trigonal	sp <sup>3</sup> d
AX <sub>4</sub> E	Tetraédrica Irregular (Gangorra)	sp <sup>3</sup> d
AX <sub>3</sub> E <sub>2</sub>	Forma “T”	sp <sup>3</sup> d
AX <sub>2</sub> E <sub>3</sub>	Linear	sp <sup>3</sup> d
AX <sub>6</sub>	Octaédrica	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>
AX <sub>5</sub> E	Piramidal de Base Quadrada	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>
AX <sub>4</sub> E <sub>2</sub>	Quadrado Planar	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>

Fonte: Elaborada pelo autor, 2024.

### 2.2.6 Teoria da Ligação de Valência (TLV)

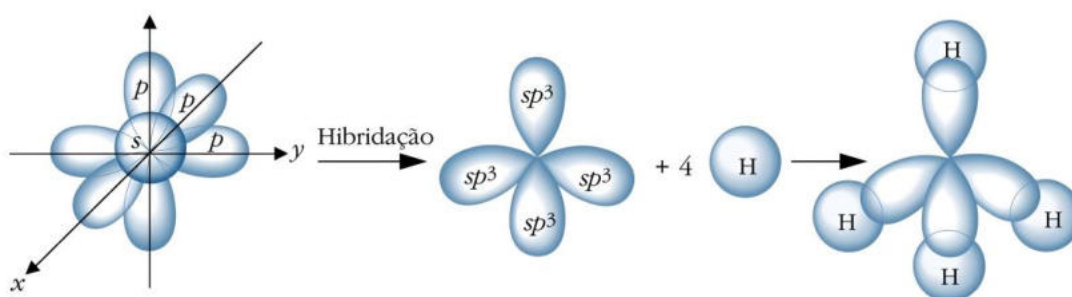
Com o advento da mecânica quântica nos anos 1920, a explicação das ligações químicas passou a incluir conceitos matemáticos e probabilísticos. As décadas de 1930 e 1940 viram o desenvolvimento da Teoria da Ligação de Valência (TLV) e da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Linus Pauling (1901-1994) foi um dos cientistas interessados em mecânica quântica para explicar as ligações químicas (PATROCÍNIO, et al, 2020).

Pauling recebeu um bolsa de pesquisa para estudar na Europa, onde teve contato com Arnold Sommerfeld (1868-1951), Niels Bohr (1885-1962), Walter Heitler (1904-1981) e Fritz London (1900-1954), sendo os últimos que apresentaram o estudo de tratamento da molécula de hidrogênio por mecânica quântica. Quando retornou aos Estados Unidos, Pauling direcionou seus estudos para ligações químicas propondo a TLV, que introduziu esses conceitos quânticos como: geometrias moleculares em termos de superposição, ressonância e hibridização de orbitais. Contudo, sem uma abordagem complexa da matemática. Para ele, as ligações químicas ocorriam por superposição de orbitais atômicos ocupados por elétrons de

spins opostos, sendo assim uma teoria intermediária para a teoria de Lewis e os conceitos da mecânica quântica (PATROCÍNIO, et al, 2020).

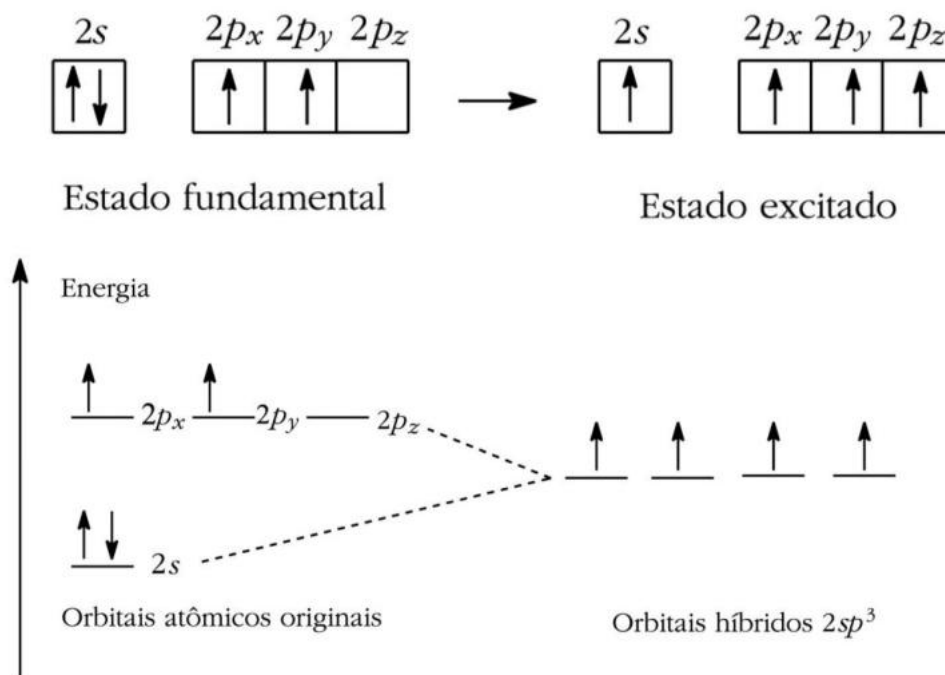
A TLV foi a primeira teoria que introduziu conceitos da mecânica quântica desenvolvida para a ligação química. A linguagem introduzida por ela, envolvendo conceitos como emparelhamento de spins, superposição de orbitais, ligação  $\sigma$ , ligação  $\pi$  e hibridização é bastante utilizada na química, especialmente na descrição das propriedades e das reações dos compostos orgânicos. Na teoria, considera-se que uma ligação é formada quando um elétron em um orbital atômico de um átomo emparelha o seu spin com o de um elétron de spin oposto em um orbital atômico de outro átomo (SILVA, 2020). A Figura 10 abaixo traz uma descrição via TLV para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ) através da combinação de três orbitais p e um orbital s, para formar quatro orbitais híbridos  $sp^3$  e a representação da interpenetração do orbital 1s de quatro átomos de hidrogênio com os orbitais  $sp^3$  do carbono, para formar o metano ( $\text{CH}_4$ ). Já a Figura 11 traz uma representação da hibridização ou hibridação entre os orbitais s e p do carbono para formar orbitais  $sp^3$ , sendo cada seta de cor preta a representação de um elétron em seu respectivo orbital. Vale ressaltar que além da  $sp^3$  existem outros tipos de hibridização entre orbitais.

**Figura 10** – Descrição via TLV para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ).



Fonte: (BARBOSA, 2004).

**Figura 11** – Representação dos níveis de energia dos orbitais originais e dos orbitais híbridos  $sp^3$  do átomo de carbono.



Fonte: (BARBOSA, 2004).

Pauling se tornou adepto da ideia de ligação química como partilha de elétrons no ano de 1919 ao ler os artigos de Lewis e Langmuir sobre o assunto. Esses autores apresentaram um modelo atômico em que os elétrons mantinham posições definidas em torno do núcleo. Contudo, Pauling viria a adotar uma visão dinâmica do átomo e da ligação química. Em 1926, ele publicou um artigo onde procurou conciliar as propostas para a ligação química de Lewis (par eletrônico compartilhado), Bohr (elétrons em movimento) e Knorr (os elétrons participantes de uma ligação orbitam em torno de dois núcleos que ligam), denominando teoria da ligação química como elétrons compartilhados em órbitas (SILVA, 2020).

Entre abril de 1926 e setembro de 1927, Pauling viajou como bolsista para a Europa para estudar a estrutura eletrônica de átomos e moléculas e a natureza das ligações químicas. Ele esteve em meio aos acontecimentos que geraram a nova mecânica quântica. O conceito de ressonância quantum-mecânica foi particularmente importante para as suas ideias, tornando-se central no desenvolvimento de sua concepção a cerca da ligação química (SILVA, 2020).

O termo ressonância foi introduzido na mecânica quântica em 1926 pelo físico teórico alemão Werner Heisenberg (1901-1976) que, para explicar os espectros de emissão dos átomos do Hélio (singlete e triplete), acabou elaborando um tratamento matemático equivalente aos dois osciladores quânticos acoplados que trocam energia, análogos à situação clássica de dois pêndulos em ressonância (SILVA, 2020).

Segundo a interpretação de Pauling, o fenômeno da ressonância quantum-mecânica se manifesta através da forma da função de onda do sistema, como uma combinação linear das funções  $\Psi^I$  e  $\Psi^{II}$ , bem como pela expressão da energia de interação eletrônica, a integral de ressonância. Mesmo admitindo a impossibilidade de verificação experimental da ressonância, Pauling defende a importância de tal interpretação para uma “compreensão intuitiva segura e produtiva das equações da mecânica quântica e dos resultados de sua aplicação” (SILVA, 2020).

A ideia de ressonância eletrônica surgiu a partir do conceito de ressonância entre diferentes estruturas eletrônicas das moléculas. Para isso, foi decisivo um avanço teórico: postular que cada configuração eletrônica está associada a uma função de onda específica. Quando uma estrutura molecular pode ser descrita como resultante de múltiplas configurações eletrônicas, a autofunção correspondente deve ser uma combinação das autofunções dessas configurações contribuintes. Cada configuração eletrônica se relaciona a uma fórmula química, logo, esse postulado permitiu que Pauling estabelecesse a conexão entre as representações químicas e a descrição quântica das moléculas (SILVA, 2020).

Pauling compreendia que, para diversas substâncias, suas propriedades não poderiam ser explicadas por uma única fórmula química baseada no modelo tradicional de ligações covalentes simples, duplas ou triplas. No lugar de rejeitar essa representação convencional e propor um novo sistema, ele defendeu sua preservação como uma abordagem prática. Para isso, introduziu a ideia de que a estrutura real das moléculas seria um híbrido das várias representações estruturais possíveis (SILVA, 2020).

A base conceitual da teoria da ressonância estava definida, permitindo a explicação de diversos fenômenos químicos com fundamento na movimentação

das estruturas eletrônicas e na dinâmica das ligações dentro dessas estruturas. Na aplicação da teoria da ressonância à mecânica quântica, se for possível descrever uma molécula (ou outro sistema) por meio de duas ou mais estruturas eletrônicas com energias aproximadamente equivalentes e que satisfaçam determinadas condições, nenhuma dessas estruturas, isoladamente, pode ser considerada como a representação exata do estado fundamental da molécula. Em vez disso, o estado real da molécula é melhor descrito como uma combinação dessas estruturas, resultando em uma configuração híbrida. Esse fenômeno confere à molécula maior estabilidade, uma vez que seu conteúdo energético é menor do que seria caso adotasse qualquer uma das estruturas individualmente. O processo pelo qual a molécula alterna entre essas diferentes configurações é chamado de ressonância, e a energia associada à sua estabilização é conhecida como energia de ressonância (SILVA, 2020).

### 2.2.7 Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM)

O modelo de Lewis é muito útil na descrição qualitativa das ligações químicas. No entanto, na discussão de questões energéticas, geometrias ou aspectos de natureza espectroscópica, é necessário fazer uso de teorias quânticas que enfocam a ligação química em termos da combinação de orbitais. Nesse tipo de abordagem, é necessário o ensino do modelo quântico para o átomo, pois considera-se que quando dois átomos se ligam, o compartilhamento eletrônico dar-se pela combinação dos orbitais que estão interagindo. Estes dois orbitais atômicos são representados pelas funções de onda  $\Psi_A$  e  $\Psi_B$ . O resultado dessa combinação é a formação de novos orbitais estendidos sobre os dois átomos, chamados de orbitais moleculares. São essas as ideias que constituem a base da Teoria dos Orbitais Moleculares (a segunda teoria baseada na mecânica quântica), proposta por Robert Mulliken (1896-1986), em 1932 (TOMA, 1997).

A TOM foi desenvolvida por Friedrich Hund (1896-1997), Robert Mulliken (1896-1986) e outros cientistas a partir da determinação de espectros moleculares e aprofundamento de abordagens matemáticas. A teoria definia que a ligação química entre átomos podia ocorrer pela combinação de orbitais atômicos descritos por

funções de onda, gerando orbitais moleculares de energia menor do que os dos orbitais atômicos de origem. A TOM recebeu maior notoriedade por seus cálculos e também por conseguir explicar moléculas mais complexas (PATROCÍNIO, et al, 2020).

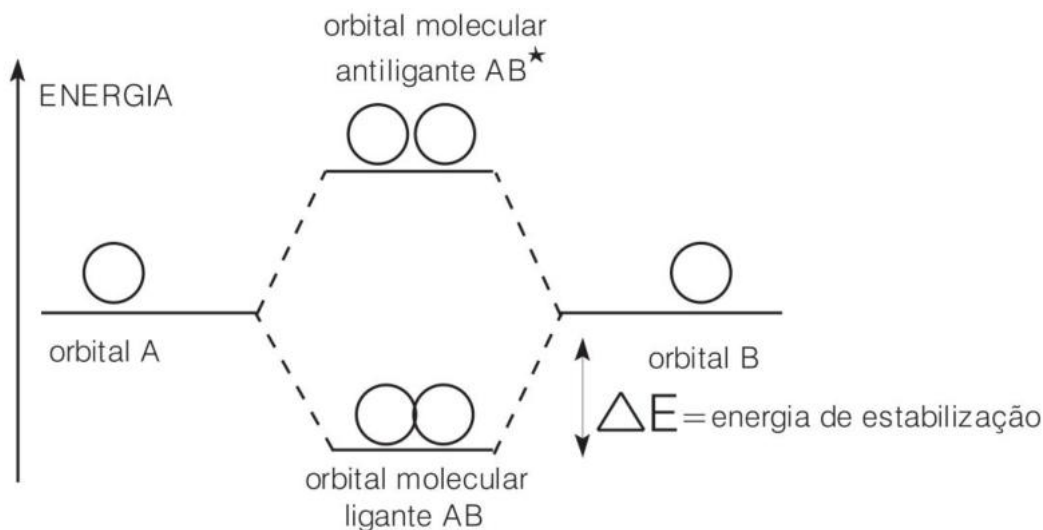
De maneira geral, um orbital molecular de uma molécula AB ( $\Psi_{AB}$ ) pode ser descrito por uma combinação linear (soma ou diferença) dos orbitais atômicos localizados em A e em B, respectivamente ( $\Psi_{AB} = c_A\Psi_A \pm c_B\Psi_B$ ). Essa combinação dos orbitais pode ocorrer em proporções variáveis, expressas pelos coeficientes  $c_A$  e  $c_B$ . Quando os orbitais são equivalentes, como os orbitais 1s na molécula de  $H_2$ , esses coeficientes são iguais, isto é,  $c_A = c_B$ . Os coeficientes diferenciam-se cada vez mais à medida que aumenta a diferença de energia entre os orbitais. Quando  $c_A \gg c_B$ , a participação do  $\Psi_A$  é dominante e o orbital molecular  $\Psi_{AB}$  se assemelha a  $\Psi_A$  e vice-versa. Isso quer dizer que os elétrons não são compartilhados igualmente, podendo ficar a maior parte do tempo em A ou em B, dependendo dos valores relativos de  $c_A$  e  $c_B$ . Isso está relacionado com a diferença de eletronegatividade entre os elementos químicos participantes (TOMA, 1997).

Na mecânica quântica, as energias são calculadas por meio da equação de Schrödinger, cuja representação genérica é do tipo  $H\Psi_{AB} = E\Psi_{AB}$ , sendo H, conhecido como operador hamiltoniano, uma expressão matemática dos termos energéticos da molécula, englobando por exemplo a energia cinética dos elétrons, a atração dos núcleos pelos elétrons de ligação, a repulsão entre os elétrons e a repulsão internuclear. A solução da equação de Schrödinger sempre leva a dois valores de energia,  $E^+$  e  $E^-$ , que estão associados às combinações, por soma ou diferença dos orbitais atômicos (TOMA, 1997).

A solução  $E^+$ , de menor energia, provém da combinação dos orbitais atômicos com o mesmo sinal, formando um orbital molecular denominado ligante, levando à estabilização da molécula. A solução  $E^-$  provém da combinação dos orbitais atômicos com sinais opostos, produzindo um orbital molecular de maior energia denominado antiligante. Uma ilustração desses orbitais pode ser visualizada na Figura 12 abaixo (TOMA, 1997).



**Figura 12** – Representação de um diagrama simplificado de orbitais moleculares.



**Fonte:** (TOMA, 1997).

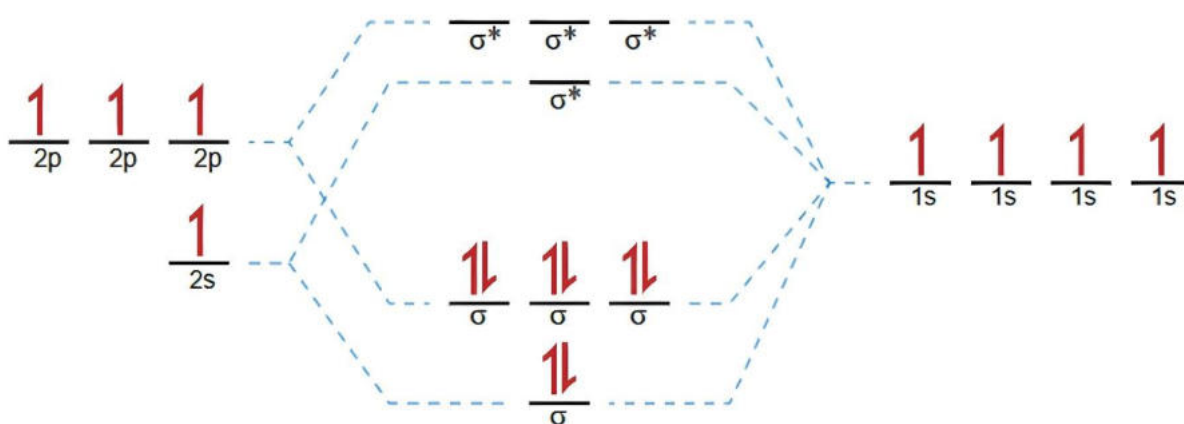
O diagrama de energia dos orbitais moleculares indica que a formação da ligação química está relacionada à estabilização da molécula, que é proporcionada pelo preenchimento do orbital ligante (menor energia). Quando temos elétrons nos orbitais antiligantes (maior energia), diminuímos essa estabilização. A combinação pela soma leva a um reforço na densidade eletrônica entre os núcleos, de modo que os elétrons possam promover uma aproximação deles, resultando em uma ligação química. Por outro lado, a combinação pela diferença desloca a densidade eletrônica da região internuclear para as extremidades opostas, deixando os núcleos atômicos expostos a uma interação bastante repulsiva. A ocupação desse orbital por elétrons favorece a quebra da ligação (TOMA, 1997).

A teoria dos orbitais moleculares permite expressar a ordem da ligação em termos da metade da diferença entre o número de elétrons ligantes e o de antiligantes. Na molécula de  $H_2$ , por exemplo, existem dois elétrons em orbital ligante e a ordem da ligação é 1, isto é, equivalente a uma ligação simples. Já no caso de uma molécula hipotética de  $He_2$ , tem-se dois elétrons ligantes e dois antiligantes, portanto, a ordem de ligação seria nula. De fato, o hélio é um gás nobre e não forma moléculas estáveis. Contudo, a teoria também prevê a existência da molécula-íon  $He_2^+$  com ordem de ligação  $1/2$ . A força da ligação depende da energia de interação entre dois orbitais, que também chamada de energia de ressonância. Quando os dois orbitais estão muito

distantes, apresentam simetrias que não permitem um recobrimento efetivo ou possuem energias muito diferentes, sua interação é diminuída (TOMA, 1997).

A Figura 13 abaixo traz uma descrição via TOM para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ), sendo cada seta de cor vermelha a representação de um elétron em seu respectivo orbital.

**Figura 13** – Descrição via TOM para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ).



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Percebe-se na figura que há a representação de um elétron do carbono em 2s e três elétrons em 2p, contudo, pode-se considerar que acontece a hibridização ou hibridação entre os orbitais s e p do carbono para formar quatro orbitais  $\text{sp}^3$ , que interpenetram o orbital 1s de quatro átomos de hidrogênio para formar o metano ( $\text{CH}_4$ ).

A descrição dos orbitais moleculares como ligantes ou antiligantes pode oferecer dificuldades para o estudante principiante. Os orbitais antiligantes contribuem para a composição dos vários estados de energia da molécula, podendo ser monitorados por meio de técnicas espectroscópicas. Portanto, isso não se trata de ficção científica e uma das consequências mais óbvias da existência dos orbitais moleculares é o aparecimento da cor nos compostos (TOMA, 1997).

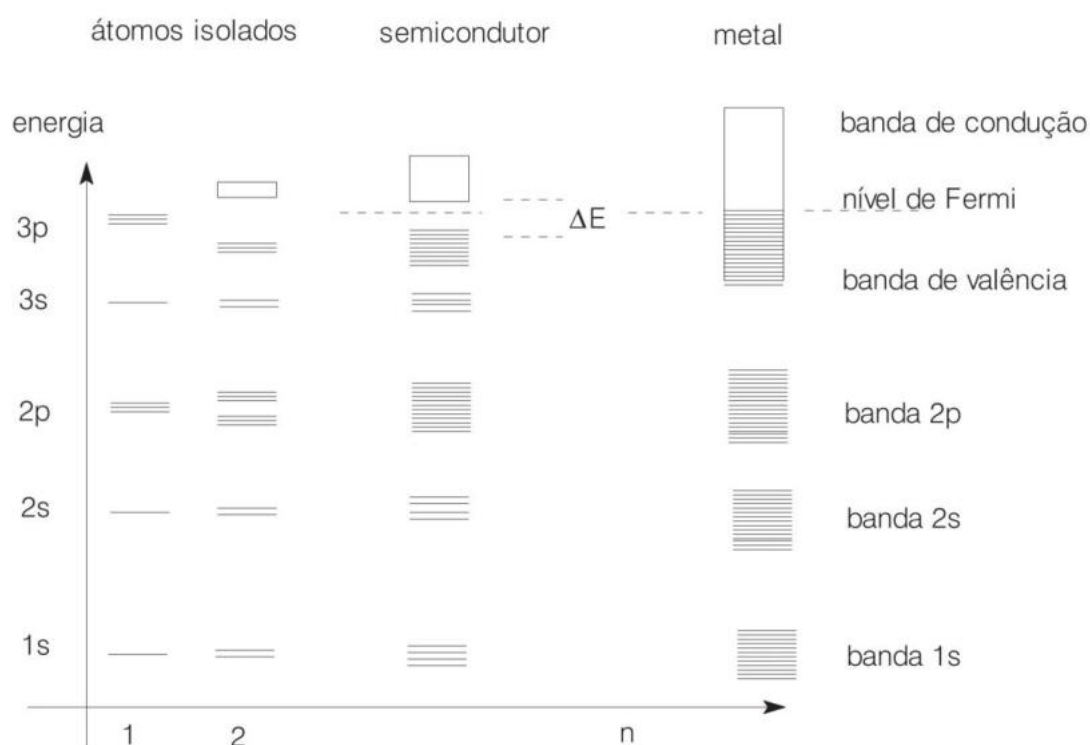
Nos orbitais moleculares, os elétrons podem passar de um orbital ligante (mais estável) para um orbital antiligante (menos estável) se absorverem uma quantidade de energia equivalente à diferença de energia entre esses orbitais. Essa diferença de

energia determina o comprimento de onda da luz absorvida. A luz não absorvida é a que é refletida ou transmitida e percebemos como cor (ATKINS, 2012).

Vale ressaltar também o modelo de bandas. A teoria de bandas admite estender a teoria dos orbitais moleculares para um número grande ou infinito de átomos. Sendo assim, como a combinação de dois orbitais atômicos conduz a dois orbitais moleculares, a combinação de  $n$  orbitais atômicos dará origem a  $n$  orbitais moleculares, porém com forte superposição, formando uma banda de orbitais (figura 9). A situação mais simples no diagrama é a do átomo isolado ( $n=1$ ) ou de moléculas pequenas ( $n=2, 3, \dots$ ), para os quais todos os níveis são discretos (TOMA, 1997).

A situação intermediária, onde tem-se bandas de valência separadas umas das outras, é comum dos elementos não metálicos encadeados. Nesses elementos, o último nível com elétrons está completo e encontra-se separado do nível vazio mais próximo por uma diferença significativa de energia ( $\Delta E$ ), como pode ser visualizado também na Figura 14. A condução eletrônica exige a promoção dos elétrons da banda cheia para a banda vazia (banda de condução), mediante energia térmica ou de luz, por exemplo. A princípio, um elemento não metálico pode se tornar condutor quando a energia de promoção for igual à diferença de energia entre os níveis ocupado e vazio. Quando essa energia não é muito grande, os sistemas são considerados semicondutores (TOMA, 1997).

**Figura 14** – Extensão dos orbitais moleculares mostrando a multiplicação dos níveis com o aumento do número de átomos, até formar bandas de orbitais moleculares.



Fonte: (TOMA, 1997).

Já no estado metálico, ocorre forte superposição entre a banda cheia e a banda vazia superior, então, a passagem do elétron para a banda de condução exige uma quantidade muito pequena de energia ( $\Delta E \approx 0$ ). Também é possível que a última banda eletrônica esteja parcialmente preenchida, apresentando vacância para condução, sem precisar da interpenetração energética com o nível vazio superior. Nesse caso, também seria observado um caráter metálico (TOMA, 1997).

Nos sistemas metálicos, os elétrons distribuem-se dentro da banda semelhante a um fluido dentro de um copo. O limite de separação entre a parte ocupada e a vazia equivaleria à superfície do líquido, portanto, forma um nível de ocupação bem-definido, que é denominado limite de Fermi. Nos semicondutores, um aumento de temperatura favorece a condução, contribuindo para a promoção dos elétrons para a banda vazia. Já nos metais, o aumento de temperatura dificulta a condução eletrônica pelo aumento da resistência ao percurso dos elétrons, devido à vibração térmica da rede (TOMA, 1997).

Nenhuma teoria de ligação química sobrepõe completamente outra, sendo cada um relevante para diferentes tipos de estudos, e que as teorias evoluíram conforme novos modelos atômicos foram desenvolvidos.

### 2.2.8 Teoria do Loge

No final da década de 1950 os únicos métodos de cálculos químico quânticos existentes eram o método da ligação de valência e o método dos orbitais moleculares de Huckel. A década de 1950 marcou o início da aplicação da mecânica ondulatória na Química e foi nesse período que o físico francês Raymond Daudel (1920-2006) iniciou seus estudos sobre a natureza da ligação química. A Figura 15 mostra o físico Daudel.

**Figura 15** – Físico francês Raymond Daudel.



**Fonte:** <https://www.uab.cat/web/about-the-uab/the-uab/honorary-doctorates-awarded/honoris-1345667138630.html?param1=1345672599399>

No ano de 1952 Daudel definiu a densidade diferencial de elétrons, grandeza calculada a partir das funções de onda que representam os orbitais atômicos e que poderia ser avaliada experimentalmente por técnicas de difração de nêutrons e de elétrons (SANDORFY, 1985). A definição da densidade diferencial de elétrons foi uma importante contribuição de Raymond Daudel para o estudo da ligação química.

Em 1953, Daudel fez o que é considerada sua maior contribuição na Química Quântica, ele definiu o “Loge” como sendo o espaço onde existe alta probabilidade de encontrar um número “n” de elétrons. Daudel usava a probabilidade próxima a 90%. Dentre as teorias que procuram descrever a ligação química, a Teoria do Loge é a mais utilizada quando se aplica a Teoria da Informação no estudo de moléculas (NALEWAJSK, 2003).

Em seu artigo "About the Nature of the Chemical Bond" (1992) (DAUDEL, 1992), Daudel relaciona o Loge para dois elétrons com spins contrários à densidade eletrônica entre dois núcleos e encontra uma relação semelhante à lei de Boyle-Mariotte para os gases. Ele destaca que esse fato não deve ser coincidência por que nuvens de elétrons podem ser tratadas como gases.

Em seu livro "Quantum Theory of the Chemical Bond" (1974) (DAUDEL, 1974), Raymond Daudel descreve a Teoria do Loge, suas definições, fundamentos e todo o formalismo matemático necessário inclusive para as funções de onda associadas ao Loge, além de aplicações para moléculas e íons com as implicações na reatividade das espécies.

É muito importante destacar que a Teoria do Loge surgiu dentro do grupo ao qual pertencia o físico Louis de Broglie, descobridor da dualidade onda-partícula e também ganhador do Prêmio Nobel de Física de 1929 e que segundo Adrien Vila-Valls em sua tese de doutorado intitulada “Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France (1925-1960)” (2012) cabia à Raymond Daudel a aplicação da Mecânica Ondulatória à Química (Pág. 196).

As ideias originadas no grupo de Louis de Broglie se espalharam pelo mundo e chegaram ao Brasil. O Prof. Daudel foi orientador no doutorado do Prof. Milan Trsic (1937-2020) que foi professor do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo–USP tendo formado diversos mestres e doutores sempre atuando na Química Teórica através do desenvolvimento de métodos de cálculo e aplicações a diversos tipos de sistemas atômicos e moleculares. A Figura 16 mostra o professor Milan Trsic.

**Figura 16 – Milan Trsic.**



**Fonte:** <https://centrodememoria.iqsc.usp.br/milan-trsic/>

### 3 METODOLOGIA

Para alcançarmos aos objetivos propostos, elaboramos um material de apoio para professores de Química do ensino médio sobre a história das teorias das ligações químicas (manual explicativo em formato de *eBook*). Esse material foi enviado à professores de Química para ser avaliado e em seguida analisamos as contribuições destes para obtermos os resultados da pesquisa.

Apresentaremos a seguir, o desenho desta pesquisa, destacando como pontos centrais: a caracterização da pesquisa; o contexto da pesquisa; os participantes da pesquisa; as etapas metodológicas; os instrumentos de produção de dados; a proposta de produto educacional e os aspectos éticos da pesquisa.

#### 3.1 CARACTERIZAÇÃO DA PESQUISA

O estudo desenvolvido foi do método qualitativo e de modalidade interventiva do tipo aplicação. Em relação às pesquisas interventivas do tipo aplicação, de acordo com Teixeira e Megid Neto (2017), elas são pesquisas que envolvem para explicação de fenômenos ou fatos: o planejamento, a execução de ações e a análise de dados obtidos.

Para Denzin e Lincoln (2006) e Gil (2002), uma pesquisa qualitativa envolve uma abordagem interpretativa do mundo, com o objetivo de entender os fenômenos em termos dos significados que as pessoas compreendem. Assim, os pesquisadores estudam os objetos em seus cenários naturais.

Dessa maneira, a validade da pesquisa não se apega ao tamanho da amostra, como na pesquisa quantitativa, mas pela profundidade com que o estudo será realizado.

Segundo Denzin e Lincoln (2006), a palavra qualitativa atribui um destaque em relação as qualidades das entidades e sobre os processos que não podem ser examinados ou medidos de forma experimental em quantidade, volume, intensidade ou frequência.



Para Godoy (2005), alguns pontos são fundamentais para obter-se uma "boa" pesquisa qualitativa: *credibilidade*, que diz respeito a apresentar resultados dignos de confiança; *transferibilidade*, não de forma generalizada, mas no sentido de realizar uma descrição densa do fenômeno, permitindo que o leitor possa imaginar o estudo em outro contexto; *confiança* no processo desenvolvido pelo pesquisador; *confirmabilidade* (ou confiabilidade) dos resultados, o que abrange avaliar se os resultados estão coerentes com os dados coletados; *explicitação cuidadosa da metodologia*, que diz respeito a detalhar minuciosamente como a pesquisa foi realizada e, por fim, *relevância das questões de pesquisa*, em relação a outros estudos realizados antes.

Dessa maneira, a pesquisa qualitativa possibilita uma compreensão aprofundada das relações e dos processos subjacentes. Esperamos alcançar uma visão mais abrangente e contextualizada das contribuições e limitações da aplicação do *eBook* na abordagem da história da ligação química.

### 3.2 CONTEXTO DA PESQUISA

A pesquisa se insere em um contexto de busca por melhorias na qualidade do ensino de Ciências no Ensino Médio brasileiro, com ênfase na Química. Esta disciplina enfrenta desafios devido à complexidade de conceitos como ligação química, que abrange várias ideias e teorias, desde o empírico até a teoria quântica. A História da química oferece uma trajetória rica de descobertas científicas que pode tornar o ensino mais interessante e contextualizado. Contudo, há uma carência de materiais instrucionais que apresentem esses conceitos de maneira acessível e prática.

Focando na história da ligação química, uma área menos explorada, a pesquisa buscou desenvolver um material de apoio que busca enriquecer o ensino da Química. Introduzir a história da ciência no Ensino Médio pode aumentar o interesse dos alunos e proporcionar uma compreensão mais aprofundada da Química. O objetivo da pesquisa é fornecer recursos didáticos aos professores, contribuindo para a formação de estudantes

### 3.3 PARTICIPANTES DA PESQUISA

Participaram da pesquisa vinte professores de escolas da rede privada e/ou pública. A escolha desses profissionais é justificada pela sua experiência prática e conhecimento atualizado do currículo do Ensino Médio, garantindo a relevância e aplicabilidade do manual explicativo produzido. A diversidade de contextos educacionais dos professores da rede pública e/ou privada oferece uma perspectiva abrangente à pesquisa, assegurando que o material seja adaptável para diferentes realidades. A participação ativa desses docentes fortalece a relação entre teoria e prática, promovendo uma troca de conhecimentos e experiências.

Para evitar exposição e preservar a identidade dos participantes da pesquisa, a cada um deles foi atribuído um código de acordo com a ordem com que enviaram as respostas. Deste modo, os códigos utilizados foram: (P1) - Professor 1; (P2) - Professor 2; (P3) - Professor 3; até o último professor (P20) – Professor 20.

### 3.4 ETAPAS METODOLÓGICAS

As etapas metodológicas propostas para o desenvolvimento desta pesquisa são as descritas a seguir:

#### **I) Revisão Bibliográfica**

Uma revisão abrangente foi realizada para coletar informações sobre a história da ligação química, desde as ideias empíricas até a teoria quântica. A pesquisa inclui livros, artigos científicos, dissertações e teses em bases de dados acadêmicos. Essa etapa permitiu a compreensão teórica dos conceitos envolvidos, identificação das lacunas existentes na literatura e embasamento para o planejamento da pesquisa;

#### **II) Desenvolvimento do Manual Explicativo (*eBook*)**

Com base na revisão bibliográfica, foi criado um material de apoio (manual explicativo em formato de *eBook*) para professores de Química do Ensino Médio. O material inclui textos explicativos que contextualizam a evolução da ligação química, utilizando figuras, tabelas e diagramas para ilustrar os conceitos de forma clara e acessível.

### **III) Seleção e Recrutamento dos Participantes**

Os professores de Química em atividade na rede pública e/ou privada foram recrutados para participar da pesquisa. Foram feitos contatos com diretores e coordenadores pedagógicos de escolas, e os professores receberam um convite formal explicando os objetivos e benefícios da pesquisa;

### **IV) Aplicação do Manual Explicativo (*eBook*)**

Os professores participantes receberam o *eBook* desenvolvido e as orientações sobre como avaliá-lo. Após lerem o material, eles responderam a um questionário detalhado que buscou avaliar a clareza, relevância e aplicabilidade do conteúdo apresentado. Essa etapa visou obter um retorno direto sobre a qualidade e utilidade do produto educacional;

### **V) Coleta de Dados**

A coleta de dados foi realizada exclusivamente por meio do questionário na plataforma do “*GOOGLE forms*” ® preenchido pelos professores após a leitura do *eBook*. As respostas do questionário forneceram informações importantes sobre as percepções dos professores em relação ao material, incluindo sugestões de melhorias e críticas construtivas.

### **VI) Análise de Dados**

Os dados coletados foram analisados utilizando técnicas de análise qualitativa. A análise desses dados forneceu subsídios para a avaliação das contribuições e limitações da aplicação do manual explicativo sobre a história da ligação química;

## **VII) Discussão e Interpretação dos Resultados:**

Com base na análise dos dados, foi realizada uma discussão e interpretação dos resultados obtidos. Nessa etapa, os resultados foram confrontados com a literatura existente, buscando evidências que apoiem ou contradigam as contribuições e limitações identificadas;

### **3.5 INSTRUMENTOS DE PRODUÇÃO E COLETA DE DADOS**

Para a coleta de dados foi elaborado um questionário na plataforma do “*GOOGLE forms*” ® e enviado para os professores participantes após a análise do *eBook* sobre a história da ligação química. O “*GOOGLE forms*” ® permite criar formulários personalizados e coletar as respostas rapidamente, possibilitando até mesmo a elaboração automática de gráficos para respostas de múltipla escolha.

A produção de dados nesta pesquisa permitiu a obtenção de informações abrangentes e detalhadas. O questionário foi estruturado para coletar dados, abordando aspectos como a clareza dos conceitos apresentados, a relevância do conteúdo para o ensino de Química no Ensino Médio, a organização e a usabilidade do material produzido. Esse questionário contou com perguntas fechadas, que permitiram uma análise quantitativa dos dados, e perguntas abertas, que proporcionaram percepções qualitativas sobre as respostas dos professores. Esta combinação de dados visou garantir uma coleta rica e detalhada, permitindo uma análise completa da eficácia e das possíveis melhorias para o *eBook*.

### **3.6 PROPOSTA DE PRODUTO EDUCACIONAL**

O produto educacional desenvolvido foi um manual explicativo em formato de *eBook* voltado para o estudo da história da ligação química, desde as ideias empíricas até a teoria quântica e está no Apêndice 2. Esse material foi cuidadosamente elaborado com base em uma revisão bibliográfica extensa e será disponibilizado para os professores de Química do Ensino Médio. o *eBook* conta com textos explicativos e ilustrações que contextualizem a evolução da ligação química, facilitando a compreensão dos conceitos históricos e científicos pelos professores e, consequentemente, pelos estudantes.

### 3.7 ASPECTOS ÉTICOS DA PESQUISA

A pesquisa sobre o material instrucional da história da ligação química foi conduzida com rigorosa aderência aos princípios éticos que regem a prática científica e educacional. Foram adotados cuidados para preservar a identidade dos professores, garantindo que os dados recolhidos sejam utilizados exclusivamente para fins de pesquisa. Esses dados foram e serão mantidos em sigilo e armazenados de forma segura e acessível apenas aos pesquisadores envolvidos. No próprio questionário tem um termo de anuência explicando esses procedimentos e assegurando o consentimento informado dos participantes. Qualquer publicação ou apresentação dos resultados será feita de maneira a preservar a privacidade e o anonimato dos participantes da pesquisa.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Como já relatado, o *eBook* (apêndice 2) foi enviado para os professores e após a leitura, os mesmos responderam ao questionário (apêndice 1) feito na plataforma “GOOGLE forms”®. Desta forma, mediante análise do questionário, relataremos aqui os resultados e discussões obtidos.

As respostas dos professores ao questionário pode ser um indicativo de que a inclusão da história no ensino de ligação química pode contribuir para o aprendizado dos estudantes.

A Tabela 4 abaixo mostra as respostas dos professores à primeira pergunta do questionário. Os professores estão descritos da seguinte forma: (P1) – Professor 1, (P2) – Professor 2, e assim sucessivamente até (P20) – Professor 20.

**Tabela 4 – Respostas dos professores à primeira questão do questionário.**

<b>1 - Você achou pertinente a inclusão da história das primeiras teorias de ligações químicas, no conteúdo de ligações químicas, no ensino médio?</b>	
P1	Sim, por trazer fatos importantes que deixam o ensino mais rico. Alguns estudantes se apegam melhor ao assunto quando sabem detalhes da construção do conceito, além de que, geralmente a forma como se ensinado nas escolas, dá a sensação de que o assunto foi inventado e já esteve pronto em uma única etapa, com isso, a inclusão da história demonstra que houve várias etapas.
P2	Sim! Por muitas vezes a história da química é esquecida no conteúdo escolar.
P3	Sim! A adoção da história da química é fundamental para que os estudantes entendam como os conceitos foram descobertos, tornando o aprendizado mais significativo, além de mostrar a evolução do conhecimento científico e inspirar o pensamento crítico.
P4	Achei muito pertinente. Conhecer a história das primeiras ligações pode despertar a curiosidade dos alunos e também estimular o interesse pelo assunto.
P5	Sim. A contextualização é importante para o processo de ensino-aprendizagem.
P6	SIM
P7	Sim, é uma abordagem muito pertinente, pois, ao tratar o assunto em seu contexto histórico, ele se torna mais prestigiado e desperta maior interesse em quem está aprendendo, além de facilitar a compreensão do conteúdo.
P8	Sim
P9	Sim. A contextualização é importante para o processo de ensino-aprendizagem.
P10	Sim. É um rico material de apoio na construção dos saberes sobre ligações químicas, apresentando suas teorias e os contextos em que estão inseridas.
P11	Sim
P12	Sim, porque constrói uma contextualização não tão comum para os estudantes, ainda mais provinda de um conteúdo que é bem abstrato.
P13	Sim. Conteúdo é de fundamental importância para a continuação da compreensão e construção da aprendizagem dos demais objetos do conhecimento.

P14	Sim. Como professor, procuro integrar a parte histórica dos conteúdos com os conceitos químicos. Portanto, este material é de grande contribuição para os professores.
P15	Sim.
P16	sim, pois dá subsídio para uma melhor compreensão do conteúdo explorado.
P17	Sim, demonstrar a história por trás da teoria faz com que o estudante a entenda.
P18	Sim. Material bem elaborado e didático.
P19	Sim
P20	Sim. A maioria dos livros didáticos não aborda a história desse tema central e de extrema importância no estudo da química. O material traz essa história de maneira concisa para que o professor consiga se inteirar rapidamente e levar esse conhecimento para os seus estudantes.

**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Em relação à questão 1, percebe-se que todos os professores reconhecem a importância da inclusão da história das primeiras teorias de ligações químicas no conteúdo de ligações químicas, no ensino médio.

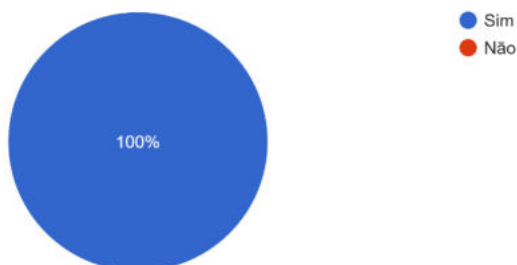
Alguns professores fizeram questão de explicar o motivo da importância da inclusão da história, como o P1 que enfatizou que a história traz fatos importantes que deixam o ensino mais rico e que alguns estudantes se apegam melhor ao conteúdo quando sabem detalhes da construção do conceito. O P3 destacou que a adoção da história da química é fundamental para que os estudantes entendam como os conceitos foram descobertos, mostrando a evolução do conhecimento científico e inspirando o pensamento crítico. Já o P7 destacou que é uma abordagem muito pertinente, pois, ao tratar o conteúdo em seu contexto histórico, torna-o mais prestigiado e pode despertar maior interesse dos estudantes, além de facilitar a compreensão do conteúdo por eles.

A Figura 17 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à segunda pergunta do questionário.

**Figura 17** – Respostas dos professores à segunda questão do questionário.

2 - O conteúdo "teorias de ligações químicas" está de acordo com o programático para a série/nível de ensino, ou seja, 1º ano do ensino médio?

20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

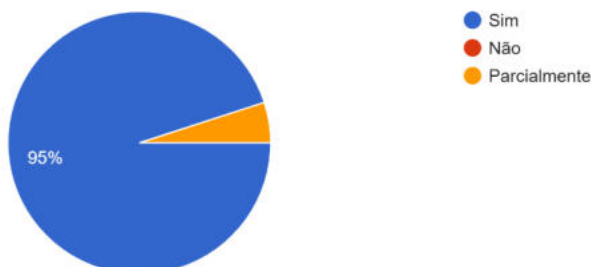
Em relação à questão 2, nota-se que todos os participantes responderam “Sim”, evidenciando que o conteúdo está de acordo com o programático para a série/nível de ensino a qual foi proposto (1º Ano do ensino médio).

A Figura 18 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à terceira pergunta do questionário.

**Figura 18** – Respostas dos professores à terceira questão do questionário.

3 - Você considera que a abordagem histórica abordada no eBook pode facilitar os seus objetivos e expectativas de aprendizagens com relação ao tema “ligações químicas”?

20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.



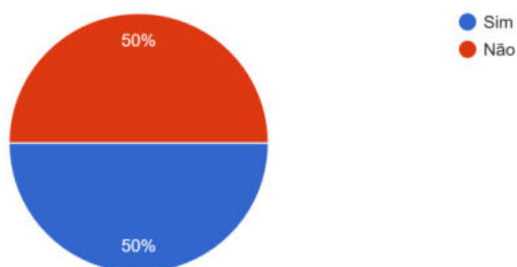
Já na pergunta correspondente aos objetivos e expectativas de aprendizagem estarem coerentes com o conteúdo, um dos participantes (5%) respondeu “Parcialmente”.

Sendo assim, pelo quantitativo de respostas positivas nas três primeiras perguntas e sobretudo, a qualidade de muitas das respostas à primeira pergunta, acreditamos que o material está adequado para atender as turmas de 1º (primeiro) ano do ensino médio, bem como aos objetivos propostos, carecendo, é claro de consulta a um número maior de professores para podermos afirmar com mais convicção.

A Figura 19 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à quarta pergunta do questionário.

**Figura 19 –** Respostas dos professores à quarta questão do questionário.

4 - Antes da leitura do eBook você já tinha algum conhecimento sobre a abordagem histórica das teorias de ligações químicas?  
20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Sobre a abordagem histórica das teorias de ligações químicas, 10 professores afirmaram já terem algum conhecimento sobre e os outros 10 responderam “não”.

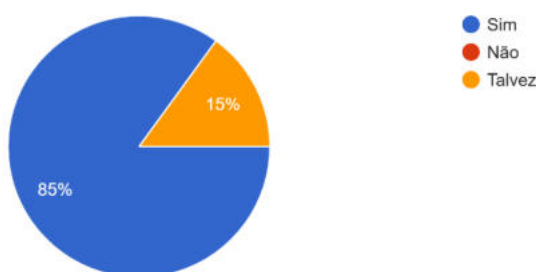
O fato de muitos professores consultados ainda não conhecerem a abordagem história das teorias de ligações químicas e, conseqüentemente não terem abordado o tema em suas aulas nos faz refletir sobre a necessidade deste conteúdo estar mais presente nos livros, artigos e cursos de formação, de forma que chegue aos professores e os mesmos possam levar para as suas aulas. Apesar dos outros 50%

dos professores consultados terem respondido que possuem conhecimento sobre a abordagem histórica das teorias de ligações químicas, não sabe-se em que nível.

A Figura 20 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à quinta pergunta do questionário.

**Figura 20** – Respostas dos professores à quinta questão do questionário.

5 - Você considera o estudo das teorias de ligações químicas um tema relevante para ser discutido no ensino médio?  
20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Quando questionados sobre a relevância da abordagem histórica das teorias de ligações químicas, a grande maioria concordou que o conteúdo era relevante, enquanto que 3 (15%) responderam “Talvez”.

Diante da quantidade de professores que responderam positivamente, acreditamos que a abordagem histórica das teorias de ligações químicas seja de grande importância no ensino médio. A inclusão da História da Química é essencial para desmistificar a maneira como a ciência é vista, na maioria das vezes, e apresentá-la como um processo dinâmico e humano.

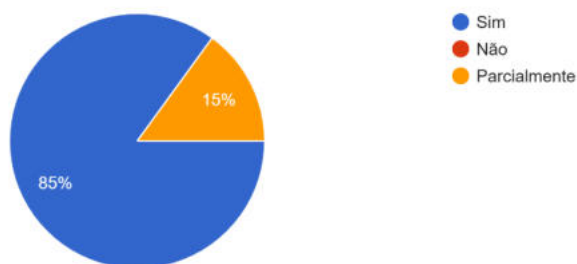
Sabe-se que é fundamental ter o domínio do conteúdo que se quer ensinar e que nada garante que o aprendizado será totalmente efetivo ou significativo para todos os estudantes. Por este motivo e como uma forma de se buscar melhorar os processos de ensino-aprendizagem, existem as estratégias de ensino.

A Figura 21 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à sexta pergunta do questionário.

**Figura 21** – Respostas dos professores à sexta questão do questionário.

6 - A proposta apresentada busca oportunizar o conhecimento prévio do estudante e o seu interesse pelo conteúdo?

20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Quando questionados se a proposta busca oportunizar o conhecimento prévio dos estudantes e seu interesse pelo conteúdo, a grande maioria concordou que o conteúdo era relevante, enquanto que 3 (15%) responderam “Parcialmente”.

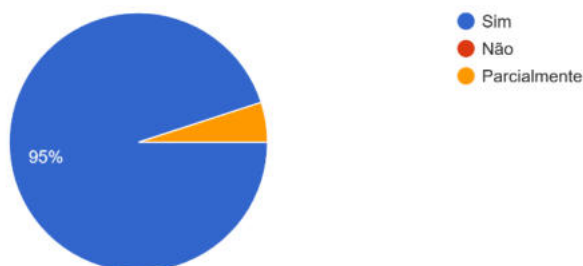
Diante da quantidade de respostas positivas, acreditamos que a abordagem histórica das teorias de ligações químicas pode contribuir por um maior interesse dos estudantes pelo conteúdo.

A Figura 22 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à sétima pergunta do questionário.

**Figura 22** – Respostas dos professores à sétima questão do questionário.

7 - Os aspectos históricos são direcionados para uma melhor compreensão do conteúdo?

20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

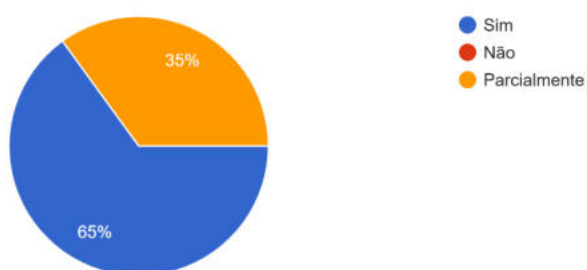
Percebe-se que a grande maioria dos professores reconhecem que os aspectos históricos apresentados na proposta são direcionados para uma melhor compreensão do conteúdo por parte dos estudantes. Apenas um dos participantes (5%) respondeu “Parcialmente”.

A Figura 23 abaixo traz o percentual de respostas dos professores em relação à oitava pergunta do questionário.

**Figura 23 – Respostas dos professores à oitava questão do questionário.**

8 - A proposta busca estimular a participação dos estudantes e pode permitir que os mesmos se sintam inseridos na construção do seu conhecimento?

20 respostas



**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Percebe-se que mais da metade dos professores reconhecem a proposta busca estimular uma maior participação dos estudantes nas aulas, permitindo que eles se sintam inseridos na construção do seu conhecimento. Contudo, 7 participantes (35%) responderam “Parcialmente”, o que indica que para alcançar os objetivos pleiteados, depende de como a abordagem histórica seria feita.

A Tabela 5 abaixo mostra os comentários finais dos professores em relação ao *eBook*.

**Tabela 5 – Comentários dos professores em relação ao eBook.**

<b>Deixe aqui sua contribuição. Aqui você pode comentar sobre as questões abordadas.</b>	
P1	-
P2	Gostei do eBook. Embora tenha muitas páginas, são páginas curtas, o que facilita a leitura para alunos do ensino médio já que hoje em dia eles são muito imediatistas. Gostei de como abordou a parte histórica e a preocupação em trazer dados iniciais, mostrando uma ciência que é mudada com o tempo. Parabéns!
P3	O eBook está ótimo! Só recomendaria a inclusão de mais imagens dinâmicas ao longo do texto.
P4	Parabéns! Muito bem construído.
P5	-
P6	Achei a abordagem histórica muito pertinente para o ensino das ligações químicas no ensino médio. Acredito que o trabalho pode ajudar outros professores a melhorarem sua prática pedagógica.
P7	O estudo das ligações químicas é fascinante, pois representa a base fundamental do estudo da matéria e de suas transformações. Abordá-lo desde seu contexto histórico até os detalhes teóricos da era quântica não apenas enriquece o aprendizado, mas também torna o tema ainda mais envolvente e necessário.
P8	-
P9	-
P10	Parabéns pelo material. Se você permitir, vou inserir nas minhas próximas aulas. É de uma riqueza de detalhes e de uma linguagem de fácil compreensão, bastante acessível aos estudantes do ensino médio e até arriscaria dizer que do 9º ano também. Este material faz o aluno refletir sobre as variadas teorias de ligações químicas e como cada uma surgiu e onde se encaixa.
P11	O material aqui elaborado é riquíssimo para ser trabalhado com os estudantes do ensino médio, de modo que facilitará sua compreensão e apreensão do conteúdo abordado.
P12	O material (eBook) é muito bom e completo, parabéns! Porém, em questões anteriores respondi "parcialmente" e "talvez" porque creio que as teorias de ligações químicas trabalhadas de forma expositiva, por si só, são massivas ao estudante. Hoje, eu trabalho ligações químicas (Lewis, VSEPR) com o máximo de tecnologia interativa, porque quando se fala em ligação (conteúdo abstrato), eles aparentam ter uma falta de interesse no conteúdo, tive (e tenho) muita dificuldade ao trabalhar o tópico. Então, achei bem interessante conectar a Química com sua história e com certeza dará certo, contanto que haja meios mais diversificados para isso.
P13	O eBook apresenta uma maneira interessante de apresentar o conteúdo aos estudantes.
P14	-
P15	Sempre fui defensor de a história ser inserida em qualquer tipo de ensino.
P16	Parabéns pela temática e pela estratégia usada na abordagem da mesma. Em relação ao questionário, acredito que poderia ser mais explorado, contudo achei muito interessante e objetivo no que tange a coleta de dados que foi proposta para o mesmo.
P17	Demonstrar os conceitos é importante para a aprendizagem, mas o único problema é que na prática não dá pra fazer tudo.
P18	O material é muito bom. Não costumo trabalhar o tema, mas sei da importância do conteúdo para os estudantes do ensino médio.
P19	Concordo parcialmente com algumas questões, pois como temos uma carga horária muito curta e uma quantidade enorme de conteúdos a serem abordados no 1º ano do EM, não temos muito tempo de abordar os contextos históricos da maioria dos conteúdos inclusive o contexto histórico das ligações química. No entanto acho essencial a abordagem do contexto histórico das ligações químicas.
P20	O material é muito rico e facilita o trabalho do docente de se inteirar do processo histórico de construção das teorias de ligações químicas.

**Fonte:** Elaborada pelo autor, 2025.

Em relação aos comentários finais, percebe-se que alguns professores trataram de pontos importantes, como o P12 que enfatizou que em questões respondeu "parcialmente" e "talvez", pois acredita que a teoria das ligações químicas trabalhada de forma expositiva, por si só, é massiva aos estudantes e que trabalha ligações químicas (Lewis, VSEPR) com o máximo de tecnologia interativa possível, pois trata-se de um conteúdo abstrato que os estudantes aparentam ter uma falta de interesse, achando interessante conectar a Química com sua história, contanto que haja meios mais diversificados para isso, como o uso de tecnologias. Já o P19 concordou parcialmente com algumas questões e enfatizou que os professores têm uma carga horária muito curta e uma quantidade muito grande de conteúdos a serem abordados no 1º ano do ensino médio, não restando tempo suficiente para abordar os contextos históricos da maioria dos conteúdos, inclusive o das teorias de ligações químicas. Contudo, O *eBook* desenvolvido para os professores facilita o acesso a abordagem histórica das teorias de ligações químicas e, em posse desse conhecimento, o docente pode utilizar as mais diversas ferramentas disponíveis para trabalhar o tema.

De acordo com Denzin e Lincoln (2006) e Gil (2002), a pesquisa qualitativa adota uma abordagem interpretativa da realidade, buscando compreender os fenômenos a partir dos significados atribuídos pelas pessoas. Dessa forma, os pesquisadores analisam os objetos em seus contextos naturais. A presente pesquisa foi realizada com vinte professores de química que atuam no ensino médio, tendo um questionário com perguntas precisas que resultaram em dados precisos que foram expostos e analisados.

A validade da pesquisa qualitativa não depende do tamanho da amostra, como ocorre na pesquisa quantitativa, mas da profundidade com que o estudo é conduzido.

Segundo Denzin e Lincoln (2006), o termo "qualitativa" enfatiza as qualidades das entidades e os processos que não podem ser analisados ou mensurados experimentalmente em termos de quantidade, volume, intensidade ou frequência.

Para Godoy (2005), uma pesquisa qualitativa considerada de qualidade deve atender a alguns critérios essenciais. Entre eles, a credibilidade, que se refere à apresentação de resultados confiáveis; a transferibilidade, que, embora não permita

generalizações, possibilita uma descrição detalhada do fenômeno, permitindo ao leitor visualizar sua aplicação em outros contextos; a confiabilidade do processo conduzido pelo pesquisador; a confirmabilidade dos resultados, garantindo que estejam alinhados com os dados coletados; a explicitação rigorosa da metodologia, com um detalhamento preciso de cada etapa do estudo; e, por fim, a relevância das questões investigadas, relacionando-as a pesquisas anteriores.

Dessa maneira, a pesquisa qualitativa possibilita uma compreensão aprofundada das relações e dos processos subjacentes. Sendo assim, com mas pesquisa realizada, esperamos ter alcançado uma visão mais abrangente e contextualizada das contribuições e limitações da aplicação do manual explicativo na abordagem da história da ligação química.

Diante dos os resultados, entendemos que é possível inserir a abordagem histórica das teorias de ligações químicas nas aulas de ensino médio, dando a ela a sua devida importância.

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ligações Químicas é um conteúdo que ainda é trabalhado em sala de aula de forma mais mecânica, somente mostrando como funciona cada tipo de ligação e trazendo exemplos. Quando incluímos uma abordagem histórica das teorias de ligações químicas, percebemos que os estudantes passam a entender que a produção científica não é estática, mas está em constante desenvolvimento. Isso pode desenvolver nos estudantes uma visão mais crítica da ciência. Eles passam a entender que cada teoria científica teve longo tempo de estudos e pesquisas para que as propostas teóricas fizessem sentido e fossem aceitas, além de entenderem que a ciência está sujeita a erros e mudanças, sofrendo influências do meio. Por isso, buscamos avançar no sentido de trazer esse conteúdo para o Ensino Médio, aproximando mais os estudantes da realidade que nos cerca.

As contribuições dos docentes que participaram da pesquisa, embora não simbolizem uma generalização, nos indicaram uma boa receptividade do nosso material e nos encorajam a melhorá-lo ainda mais para torná-lo mais atraente e de melhor compreensão.

Esperamos que com a inclusão da história das teorias de ligações químicas, os estudantes sejam conduzidos a um outro patamar na compreensão da vida na forma como a conhecemos no nosso planeta.

Pretendemos fazer com que o nosso Produto Educacional (manual explicativo em formato de *eBook*) consiga atingir um quantitativo maior de professores, visto que materiais digitais podem ser lidos por meio de diversos equipamentos eletrônicos e em diferentes momentos da rotina dos professores, facilitando o acesso.

Por fim, esperamos que o nosso Produto Educacional percorra um caminho para além do ensino médio e que professores possam utilizá-lo até mesmo nas aulas dos cursos de Graduação e Pós-graduação em Química. Ainda que tenha sido desenvolvido para o ensino médio, acreditamos que professores de nível superior podem utilizá-lo e explorá-lo de maneira mais profunda em suas aulas.



## REFERÊNCIAS

ABRANTES, P. C. C. **Imagens de natureza e imagens de ciência**. Campinas: Papirus, 1998.

ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de Química**: questionando a vida moderna e o meio ambiente. Trad. Ricardo Bicca de Alencastro. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.

BARBOSA, L. C. de. **Introdução à Química Orgânica**. São Paulo: Prentice Hall, 2004.

BENFEY, O. T. **From vital force to structural formulas**. Chemical Heritage Foundation, 1992.

BENSAUDE-VINCENT, B.; STENGERS, I. **História da química**. Lisboa: Instituto Piaget, 1992.

BEZERRA, A. S.; SILVA, R. R. Ligações químicas: as primeiras teorias. **Educación química**. México. 12, (3) 179-183. 2001. Disponível em: <https://revistas.unam.mx/index.php/reg/article/view/66346>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

BRASIL. **Parâmetros Curriculares Nacionais de Ensino Médio**: ciências da natureza, matemática e suas tecnologias. Brasília: MEC/SEMT, 1999. Disponível em: [ciencian.pdf \(mec.gov.br\)](#). Acesso em 27 de jul. 2024.

BRASIL. **PNLD 2018**: química – guia de livros didáticos – ensino médio. Brasília: Ministério da Secretaria de Educação Básica, 2018. Disponível em: [Guia Digital do PNLD 2018 \(fnde.gov.br\)](#). Acesso em 27 de jul. 2024.

CAMEL, T. O.; KOEHLER, C. B. G.; FILGUEIRAS, C. A. L. A química orgânica na consolidação dos conceitos de átomo e molécula. **Química Nova**, v. 32, n. 2, p. 543-553, 2009. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/237891046\\_A\\_quimica\\_organica\\_na\\_consolidacao\\_dos\\_conceitos\\_de\\_atomo\\_e\\_molecula](https://www.researchgate.net/publication/237891046_A_quimica_organica_na_consolidacao_dos_conceitos_de_atomo_e_molecula). Acesso em: 29 de jul. 2024.

CELESTINO, L. M. L. **Análise sobre a história das ligações químicas**. 2022. 33 f. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Ciências) - Instituto de Ciências

Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, 2022.

COFFEY, P. **Cathedrals of science: The personalities and rivalries that made modern chemistry**. Oxford University Press, 2008.

DAUDEL, Raymond. **Quantum theory of the chemical bond**. D. Reidel Publishing Company, 1974.

DAUDEL, Raymond. About the nature of the chemical bond. **Journal of molecular structure. Theochem**, v. 261, p. 113-114, 1992. Disponível em: [About the nature of the chemical bond \(inist.fr\)](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.

DENZIN, N. K.; LINCOLN, Y. S. Introdução: a disciplina e a prática da pesquisa qualitativa. In: DENZIN, N. K. e LINCOLN, Y. S. (Orgs.). **O planejamento da pesquisa qualitativa: teorias e abordagens**. 2. ed. Porto Alegre: Artmed, p. 15-41, 2006.

FERNANDES, Maria Angélica Moreira; PORTO, Paulo Alves. Investigando a presença da História da Ciência em livros didáticos de Química Geral para o Ensino Superior. **Química Nova**, v. 35, n. 2, p. 420-429, 2012. Disponível em: <https://repositorio.usp.br/item/002277787>. Acesso em: 01 de dez. 2023.

FERNANDEZ, C.; MARCONDES, M. E. Concepções dos estudantes sobre ligação química. **Química Nova na Escola**, v. 24, p. 20-24, 2006. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc24/af1.pdf>. Acesso em: 26 de jul. 2024.

FILGUEIRAS, L. A. C. Gilbert Lewis e o centenário da teoria de ligação por par de elétrons. **Química Nova na Escola**, Vol. 39, No. 10, 1262-1268, 2016. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/MycQJGRnj35mmvQWcsFx7zD/>. Acesso em: 26 de jul. 2024.

GIL, A. C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. São Paulo: Editora Atlas, 2002.

GILLESPIE R. J., ROBINSON E. A., Gilbert N. Lewis and the **Chemical Bond: The Electron Pair and the Octet Rule from 1916 to the Present Day**. **Journal of Computational Chemistry**. v. 28, n. 1, p. 87-97, 2007. Disponível em: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/17109437/>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

GODOY, A. S. Refletindo sobre critérios de qualidade da pesquisa qualitativa. **Revista Eletrônica de Gestão Organizacional**, Recife, v. 3, n. 2, p. 81-89, 2005. Disponível em: <https://periodicos.ufpe.br/revistas/gestaoorg/article/view/21573>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

HIRAYAMA, Marcos Paulo; PORTO, Paulo Alves. Elementos de História e Filosofia da Química Segundo Professores do Ensino Médio: relações química/sociedade. **Revista da Sociedade Brasileira de Ensino de Química**, v. 2, n. 1, p. e022104-e022104, 2021. Disponível em: <https://sbenq.org.br/revista/index.php/rsbenq/article/view/16>. Acesso em: 01 de dez. 2023.

IHDE, A. J. **The development of the modern chemistry**. New York: Dover publications, 1984.

JUSTI, R. S.; A afinidade entre as substâncias pode explicar as reações químicas? **Química Nova na Escola**. n.7, p.26-29, Maio, 1998. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc07/historia.pdf>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

KOHLER, R. E. Irving Langmuir and the “Octet” Theory of Valence. **Historical Studies in the Physical Sciences**, v. 4, 39–87, 1974. Disponível em: <https://online.ucpress.edu/hsns/article-abstract/doi/10.2307/27757327/47930/Irving-Langmuir-and-the-Octet-Theory-of-Valence?redirectedFrom=fulltext>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

KOTZ, John C. **Química geral e reações químicas**. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2005.

LAIDLER, K. J. **The world of physical chemistry**. Oxford: Oxford University Press, 1993.

LEWIS, G. N. The atom and the molecule. **Journal of the American Chemical Society**, v. 38, n. 4, p. 762-785, 1916. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja02261a002>. Acesso em 11 de ago. 2025.

LEWIS, G.N. **Valence and the structure of atoms and molecules**. New York: The Chemical Catalog Company, 1923. Disponível em: <https://babel.hathitrust.org/cgi/pt?id=uc1.b3219599&seq=7>. Acesso em: 11 de ago. 2025.

MATTHEWS, M. R. História, filosofia e ensino de ciências: a tendência atual de reaproximação. **Caderno Catarinense de Ensino de Física**, v. 12, n. 3, p. 164-214, 1995. Disponível em: <https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/7084>. Acesso em: 28 de jul. 2024.

MOCELLIN, R. C. A química newtoniana. **Química Nova**, v. 29, n. 2, p. 388-396, 2006. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/P4z4BYWZwjiFssQXBtgTSyp/>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

NALEWAJSKI, Roman F. Princípios de informação na teoria de loge. **Chemical physics letters**, v. 375, n. 1-2, p. 196-203, 2003. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261403008029>. Acesso em: 04 de mar. 2025.

NAVARRO, M., FÉLIX, M., MILARÉ, T. A História da Química em livros didáticos do Ensino Médio. **Revista Ciência, Tecnologia & Ambiente**, v. 1, n. 1, 2015. Disponível em: <https://www.revistacta.ufscar.br/index.php/revistacta/article/view/12>. Acesso em: 01 de dez. 2023.

PATROCÍNIO, Analouise Almeida do et al. O Desenvolvimento histórico do conceito de ligação química. Trabalho apresentado em anais do **20º Encontro Nacional de Ensino de Química (ENEQ Pernambuco)**. Anais de Recife (PE) UFRPE/UFPE, 2020. Disponível em: <https://www.even3.com.br/anais/enegpe2020/245145-o-desenvolvimento-historico-do-conceito-de-ligacao-quimica/>. Acesso em 29 de jul. 2024.

PENHA, A. F.; SILVA, J. L. P. B. Uma realidade do conhecimento de estudantes de licenciatura em química sobre ligação química. In: VIII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 2011. **Anais...**Campinas, 2011. Disponível em: [https://abrapec.com/atas\\_enpec/viiienpec/resumos/R1236-1.pdf](https://abrapec.com/atas_enpec/viiienpec/resumos/R1236-1.pdf). Acesso em: 29 de jul. 2024.

PEREIRA, L. S.; SILVA, J. L. P. B. Uma História do Antiatomismo: Possibilidades para o Ensino de Química. **Química Nova na Escola**. São Paulo, v. 40, n. 1, p. 19-24, 2018. Disponível em: [http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc40\\_1/05-HQ-28-17.pdf](http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc40_1/05-HQ-28-17.pdf). Acesso em: 29 de jul. 2024.

PIRES, R. G., AMARAL, C. L. C., PALANCH, W. B. de L. HISTÓRIA DA CIÊNCIA EM LIVROS DIDÁTICOS DE QUÍMICA: CARACTERÍSTICAS DAS PESQUISAS SOBRE A TEMÁTICA. **Revista Ciências & Ideias**, 10(3), 178–190, 2019. Disponível

em: <https://revistascientificas.ifrj.edu.br/index.php/reci/article/view/1164>. Acesso em: 01 de dez. 2023.

QUADROS, Ana Luiza de; SILVA, Ariane Suelen Freitas; MORTIMER, Eduardo Fleury. Relações pedagógicas em aulas de ciências da Educação Superior. **Química Nova**, v. 41, p. 227-235, 2018. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/xjXBvSnqghwXK88WC5X8Y7F/?format=html>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

ROCKE, A. J. It began with a daydream: the 150th anniversary of the Kekulé benzene structure. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 54, n. 1, p. 46-50, 2015. Disponível em: <https://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/spectrum/Kekule.pdf>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

SANDORFY, C. Professor Raymond Daudel. **Journal of Molecular Structure: THEOCHEM**, v. 123, n. 3-4, p. 165-169, 1985.

SILVA, C. P.; FIGUEIRÔA, S. F. M.; NEWERLA, V. B.; MENDES, M. I. P. Subsídios para o uso da história das ciências no ensino: exemplos extraídos das geociências. **Ciência & Educação**, v. 14, n. 3, p. 497-517, 2008. Disponível em: [SciELO - Brasil - Subsídios para o uso da História das Ciências no ensino: exemplos extraídos das geociências Subsídios para o uso da História das Ciências no ensino: exemplos extraídos das geociências](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.

SILVA, M. A. S. **Teoria do orbital molecular: uma proposta de aplicação no ensino médio de química**. 2020. 94 f. Dissertação (Programa de Mestrado Profissional em Química), Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2020.

TEIXEIRA, P. M. M.; MEGID NETO, J. Uma proposta de tipologia para pesquisas de natureza interventiva. **Ciência & Educação**, Bauru, v. 23, n. 4, p. 1055-1076, 2017. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/ciedu/a/cBjf7MPDSy5V5JYwFJR4bd/abstract/?lang=pt>. Acesso em: 11 de jul. 2024.

TOMA, H. E. Ligação química: abordagem clássica ou quântica?. **Química Nova na Escola**, v. 6, n. 2, p. 8-12, 1997. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc06/conceito.pdf>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

VILA-VALLS, Adrien. **Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France (1925-1960)**. 2012. Tese de Doutorado. Université Claude Bernard-Lyon I. Disponível em: [Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en](#)

[France \(1925-1960\) - TEL - Thèses en ligne \(hal.science\)](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.

# **APÊNDICE 1**

QUESTIONÁRIO ENVIADO AOS PROFESSORES PARTICIPANTES

O questionário enviado aos professores participantes serviu para avaliar o manual explicativo em formato de *eBook* intitulado "A HISTÓRIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA: DO EMPÍRICO À TEORIA QUÂNTICA" desenvolvido pelo mestrando Ronald Prazeres e pelo orientador Luciano de Azevedo e foi elaborado na plataforma "GOOGLE forms"®.

## **Questionário:**

### **Endereço de e-mail:**

Questões para traçar um perfil dos professores participantes da pesquisa.

### **Nível de escolaridade:**

### **Disciplina (s) que leciona:**

### **Tempo de experiência de ensino:**

### **Instituição (ou instituições) de ensino que atua:**

Federal

Estadual

Municipal

Privada

### **Nível de escolaridade que atua como professor:**

Ensino Fundamental

Ensino Médio Ensino

Superior

Questões relacionadas ao conteúdo abordado no material didático.

**Q1: Você achou pertinente a inclusão da história das primeiras teorias de ligações químicas, no conteúdo de ligações químicas, no ensino médio?**



**Q2: O conteúdo "teorias de ligações químicas" está de acordo com o programático para a série/nível de ensino, ou seja, 1º ano do ensino médio?**

Sim

Não

**Q3: Você considera que a abordagem histórica abordada no eBook pode facilitar os seus objetivos e expectativas de aprendizagens com relação ao tema "ligações químicas"?**

Sim

Não

Parcialmente

**Q4: Antes da leitura do eBook você já tinha algum conhecimento sobre a abordagem histórica das teorias de ligações químicas?**

Sim

Não

**Q5: Você considera o estudo das teorias de ligações químicas um tema relevante para ser discutido no ensino médio?**

Sim

Não

Talvez

Questões relacionadas aos fundamentos teóricos-metodológicos do ensino por investigação.

**Q6: A proposta apresentada busca oportunizar o conhecimento prévio do estudante e o interesse pelo conteúdo?**

Sim

Não

Parcialmente

**Q7: Os aspectos históricos são direcionados para uma melhor compreensão do conteúdo?**

Sim

Não

Parcialmente

**Q8: A proposta busca estimular a participação dos estudantes e pode permitir que os mesmos se sintam inseridos na construção do seu conhecimento?**

Sim

Não

Parcialmente

**Deixe aqui sua contribuição. Aqui você pode comentar sobre as questões.**

## **APÊNDICE 2**

PRODUTO EDUCACIONAL



# A HISTÓRIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA: DO EMPÍRICO À TEORIA QUÂNTICA

Ronald Silva dos Prazeres

Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares Neto



# SUMÁRIO

1 - Introdução.....	3
2 - As Teorias de Ligações Químicas.....	8
2.1 - Aspectos Históricos.....	8
2.2 - Teoria Eletroquímica da Ligação Química (Teoria Dualística)..	10
2.3 - Teoria Positivo-negativa.....	12
2.4 - Teoria da Ligação de Lewis (Teoria do Par Eletrônico).....	17
2.5 - Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons Livres (Modelo VSEPR).....	26
2.6 - Teoria da Ligação de Valência (TLV).....	31
2.7 - Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM).....	37
2.8 - Teoria do Loge.....	43
Referências.....	48



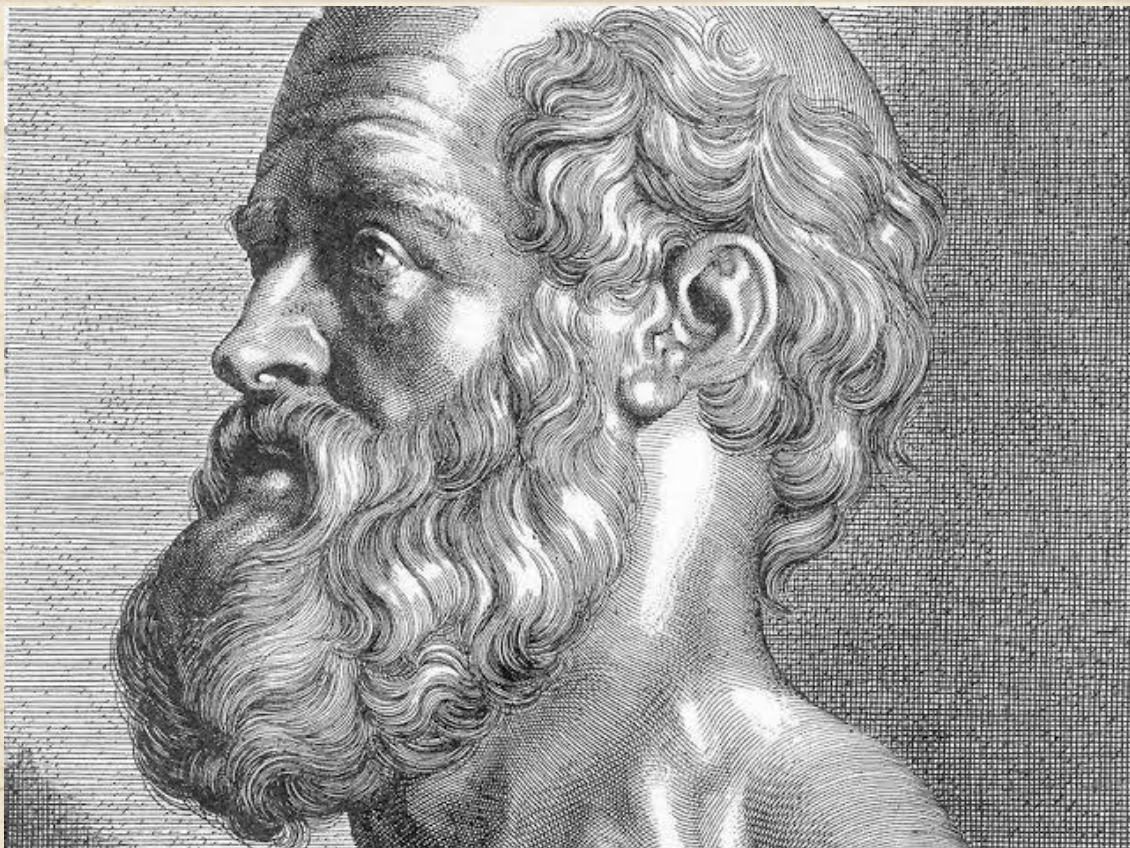
# 1 - Introdução

As tentativas mais antigas para explicar as interações entre as substâncias podem ser encontradas com os filósofos gregos Empédocles e Hipócrates (séc. V a.C.). Eles atribuíam sentimentos como amor e ódio aos elementos, como se os átomos fossem seres humanos e acreditavam que a atração ou repulsão das substâncias estavam relacionadas a estes sentimentos. Já no período alquimista, acreditava-se que as interações dos elementos ocorriam pelas semelhanças entre eles e não porque possuíam sentimentos (JUSTI, 1998).





**Filósofo grego Empédocles.**

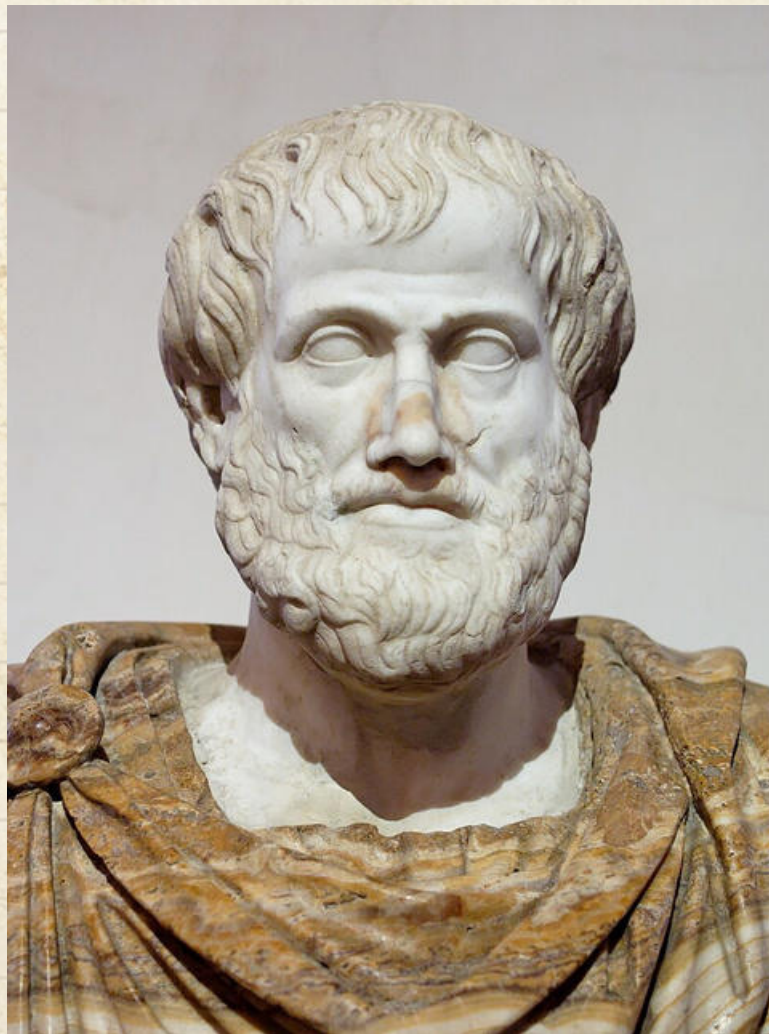


**Filósofo grego Hipócrates.**



No século posterior, Aristóteles (séc. IV a.C.) também cita fatores que podem influenciar a ocorrência de transformações, evidenciando afinidades e diferenças entre as substâncias. Estas ideias sobre afinidade entre os átomos influenciaram o pensamento de muitos cientistas até o século XVII, passando pelo período da alquimia com certa atenção às transformações e formação de substâncias, mostrando alguns registros de que as substâncias não se combinavam devido a sentimentos, mas por causa de suas semelhanças (JUSTI, 1998).



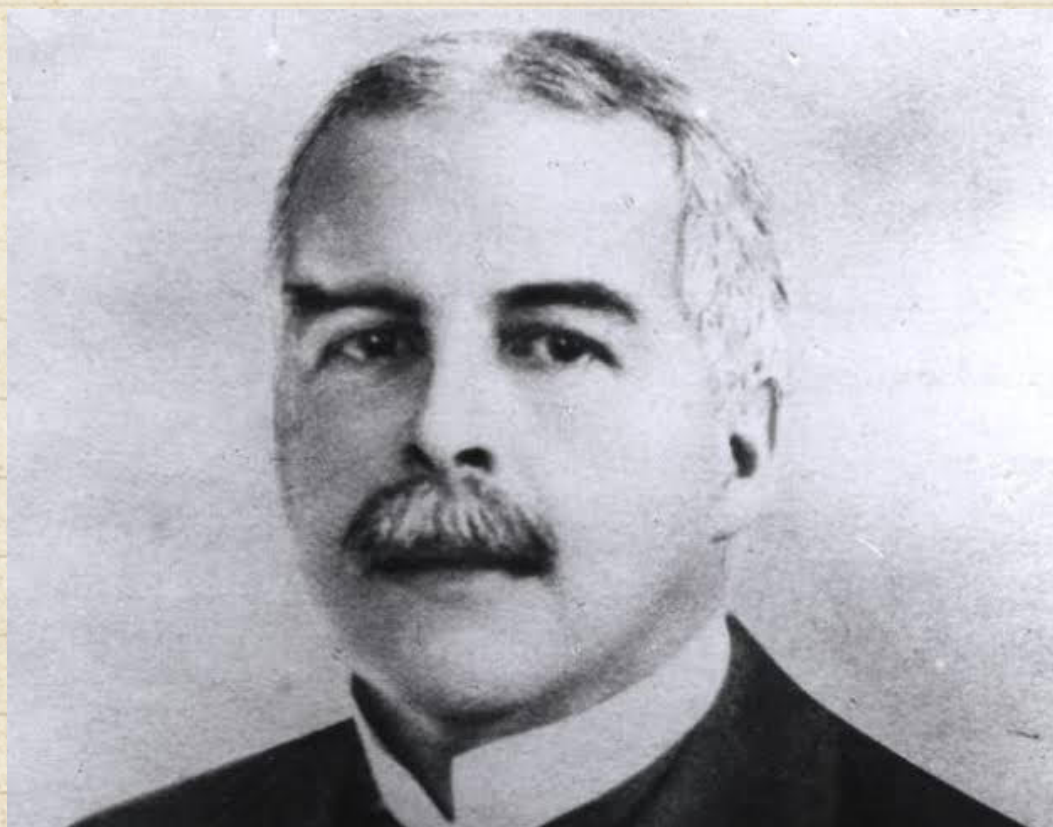


Filósofo grego Aristóteles.

**A expressão ligação química surgiu apenas na segunda metade do século XIX, contudo, desde a Antiguidade evidenciam-se ideias sobre a transformação da matéria (ABRANTES, 1998; BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).**



Nos livros didáticos, Gilbert Newton Lewis (1875-1946) é apresentado como o primeiro cientista a propor uma teoria sobre a ligação química para explicar a interação dos átomos resultando na formação de composto. No entanto, antes de Lewis, outros químicos propuseram ideias sobre as ligações químicas, mas não aparecem na grande maioria dos livros didáticos (FILGUEIRAS, 2016).



Físico e químico estadunidense Gilbert Newton Lewis.



# **2 - As Teorias de Ligações Químicas**

## **2.1 - Aspectos Históricos**

No período alquimista, acreditava-se que as interações dos elementos ocorriam pelas semelhanças entre eles e não porque possuíam sentimentos (JUSTI, 1998).

No século posterior, Aristóteles (séc. IV a.C.) também cita fatores que podem influenciar a ocorrência de transformações, evidenciando afinidades e diferenças entre as substâncias. Estas ideias sobre afinidade entre os átomos influenciaram o pensamento de muitos cientistas até o século XVII, passando pelo período da alquimia com certa atenção às transformações e formação de substâncias, mostrando alguns registros de que as substâncias não se combinavam devido a sentimentos, mas por causa de suas semelhanças (JUSTI, 1998).



**A expressão ligação química surgiu apenas na segunda metade do século XIX, contudo, desde a Antiguidade evidenciam-se ideias sobre a transformação da matéria (ABRANTES, 1998; BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).**



## 2.2 - Teoria Eletroquímica da Ligação Química (Teoria Dualística)

As primeiras ideias de que as ligações químicas tinham natureza elétrica e surgiram dos experimentos de William Nicholson (1753-1815) e Anthony Carlisle (1768-1840), que realizaram a eletrólise da água, conseguindo separá-la em hidrogênio e oxigênio. Em 1811, o químico sueco Jöns Jakob Berzelius (1779-1848) desenvolveu uma teoria de atração elétrica, sugerindo que cada átomo possuía um ou mais polos elétricos com cargas positivas e negativas em lados opostos, similares aos polos de um ímã. A atração entre átomos ocorria devido à neutralização das cargas elétricas opostas (BEZERRA; SILVA, 2001).



Então, em 1818, Berzelius desenvolveu a teoria eletroquímica da ligação (ou teoria dualística). Segundo ela, todos os átomos eram positiva ou negativamente carregados. Os átomos positivos repeliam os positivos e os negativos repeliam os negativos. A combinação só ocorria entre átomos positivos e negativos. Assim, esta primeira teoria da ligação química foi inicialmente aceita por físicos e químicos e se ajustava perfeitamente aos compostos da química mineral (BEZERRA; SILVA, 2001).



## 2.3 - Teoria Positivo-negativa

Em 1897, Joseph John Thomson (1856–1940), físico que dirigiu o importante laboratório Cavendish na Universidade de Cambridge, na Inglaterra, apresentou em sua pesquisa a presença de partículas negativas nos átomos – os elétrons. Na teoria proposta por Thomson, o elétron seria o responsável pela atração elétrica entre os átomos (BEZERRA; SILVA, 2001).



Físico britânico Joseph John Thomson.



Thomson afirmava que a atração entre dois átomos resultava sempre que um dos átomos doava um elétron para o outro. Assim, o átomo que recebeu o elétron ficaria negativamente carregado e o átomo que perdeu o elétron ficaria com uma carga resultante positiva. Então, os dois átomos teriam cargas opostas e se atraíam. Em 1903, Johannes Stark (1874-1957) sugestionou que a união entre átomos seria resultado do compartilhamento de um elétron por um par de átomos em uma molécula (BEZERRA; SILVA, 2001).



Em 1904, na Alemanha, o químico Richard Abegg (1869-1910) desenvolveu, uma teoria eletrostática para a ligação química idêntica à de Thomson. Porém, sua “regra do octeto” trazia indicação do número máximo de elétrons envolvidos em uma ligação. Abegg verificou que um mesmo átomo tinha carga positiva ou carga negativa em diferentes compostos e que o somatório do módulo destas cargas muitas vezes era oito. Exemplo: cloro com carga -1 no cloreto de sódio ( $\text{NaCl}$ ) e carga +7 no ácido perclórico ( $\text{HClO}_4$ ); o somatório do módulo das cargas igual a oito. A regra de Abegg obteve grande popularidade entre os físico-químicos (BEZERRA; SILVA, 2001).

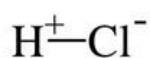


Diversos químicos concordavam com a ideia de Thomson de que uma ligação entre dois átomos ocorria quando um dos átomos doava um elétron ao outro. Essa teoria era frequentemente chamada de teoria positivo-negativa (pois como resultado da combinação de átomos, cada um passava a conter uma carga positiva ou negativa). Ela funcionava muitíssimo bem para a maioria dos compostos inorgânicos ou polares, como os resultantes da combinação de um metal com um não-metal (BEZERRA; SILVA, 2001).

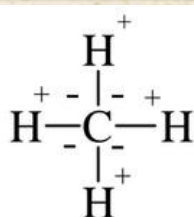
Através da eletrólise com compostos iônicos, os químicos demonstraram experimentalmente a existência de átomos com carga positiva e átomos com carga negativa, parecendo verificado o postulado fundamental da teoria (BEZERRA; SILVA, 2001).



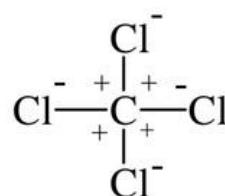
Entretanto, a aplicação da teoria positivo-negativa para compostos orgânicos, ou para compostos apolares, trazia sérias dificuldades. Átomos com cargas positivas e negativas deveriam existir nesses compostos, mas todas as tentativas para comprovar essa presença foram falhas. A imagem abaixo mostra exemplos de estruturas eletrônicas de acordo com a teoria positivo-negativa (BEZERRA; SILVA, 2001).



Cloreto de Hidrogênio



Metano



Tetracloreto de Carbono



## 2.4 - Teoria da Ligação de Lewis (Teoria do Par Eletrônico)

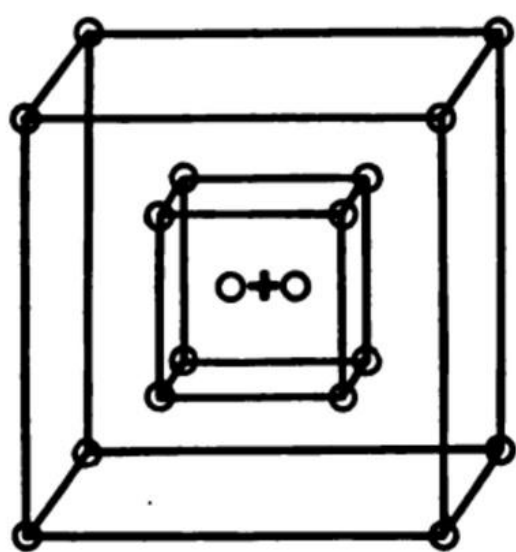
Em 1916, Lewis e também o cientista alemão Walther Kossel (1888-1956) propuseram novas teorias de ligação química independentemente. Os dois se basearam nas ideias de Richard Abbeg sobre a relação entre os elétrons e a valência dos átomos. Segundo Abbeg, existiam a valência positiva (o número de elétrons negativos frouxamente conectados no átomo) e a valência negativa (a capacidade de um átomo remover ou atrair um certo número de elétrons de um outro átomo (DRUDE, 1904 apud LAIDLER, 1993). Para Abbeg, todos os átomos tinham valências negativas e positivas, e a soma destas seria igual a oito (LAIDLER, 1993).



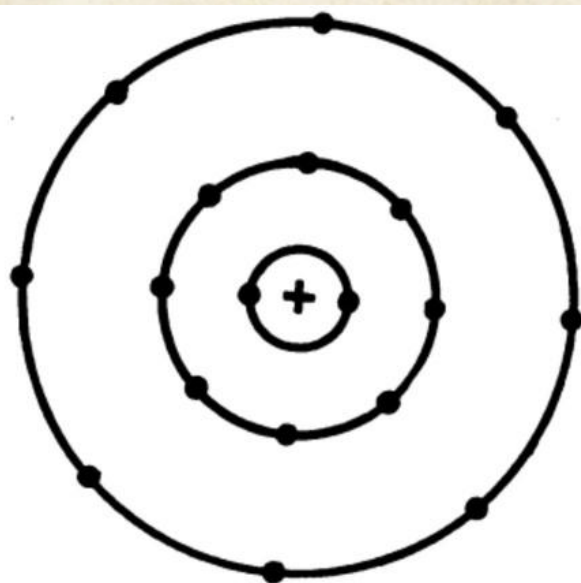
**Kossel, baseando-se nessas ideias, propôs a chamada teoria das ligações polares, onde uma ligação química ocorreria devido à transferência de elétrons entre dois átomos, resultando em uma atração eletrostática entre eles (LAIDLER, 1993). Já Lewis, inspirado pelo trabalho de Abbeg, no mesmo ano, propôs que a ligação química deveria ser compreendida como a transferência ou compartilhamento de elétrons entre dois átomos, resultando em uma configuração eletrônica semelhante à de um gás nobre, com oito elétrons ao redor do núcleo atômico (COFFEY, 2008; IHDE, 1984).**



Kossel e Lewis também foram inspirados pelas formas de representação dos átomos comuns na época, como mostra abaixo. Kossel utilizou a representação planetária, semelhante à utilizada por Bohr, para elucidar sua teoria de ligação. Já Lewis apresentou o modelo do “átomo cúbico”, no qual os elétrons ocupam os vértices de um cubo imaginário em torno do núcleo atômico, para explicar a valência e formação das ligações (IHDE, 1984).



Lewis, 1916



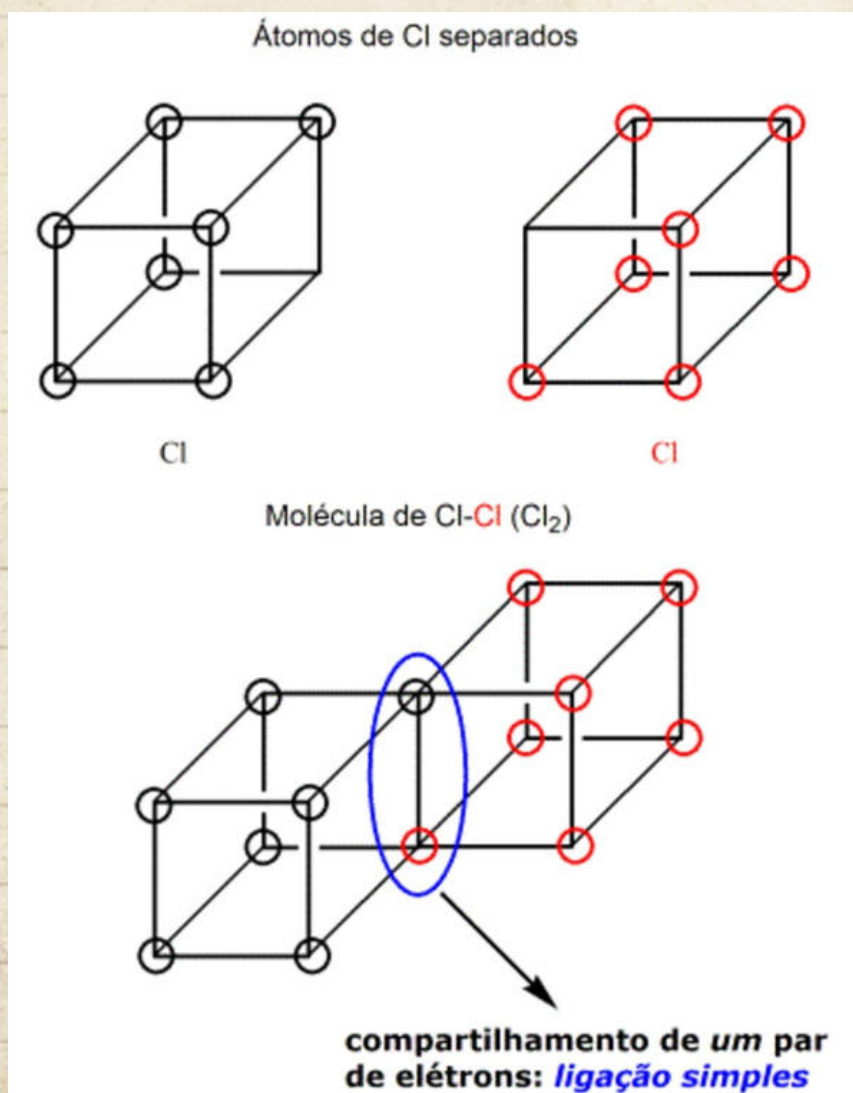
Kossel, 1916



**Para Lewis, a ligação química ocorreria através do compartilhamento de elétrons ao se aproximarem os átomos cúbicos em relação aos seus vértices, arestas e faces. Ao compartilharem elétrons, os átomos deveriam adquirir a configuração eletrônica de um gás nobre (oito elétrons de valência). Usando esse modelo, Lewis tentou explicar as ligações químicas e também a disposição espacial dos átomos nas moléculas (LAIDLER, 1993).**

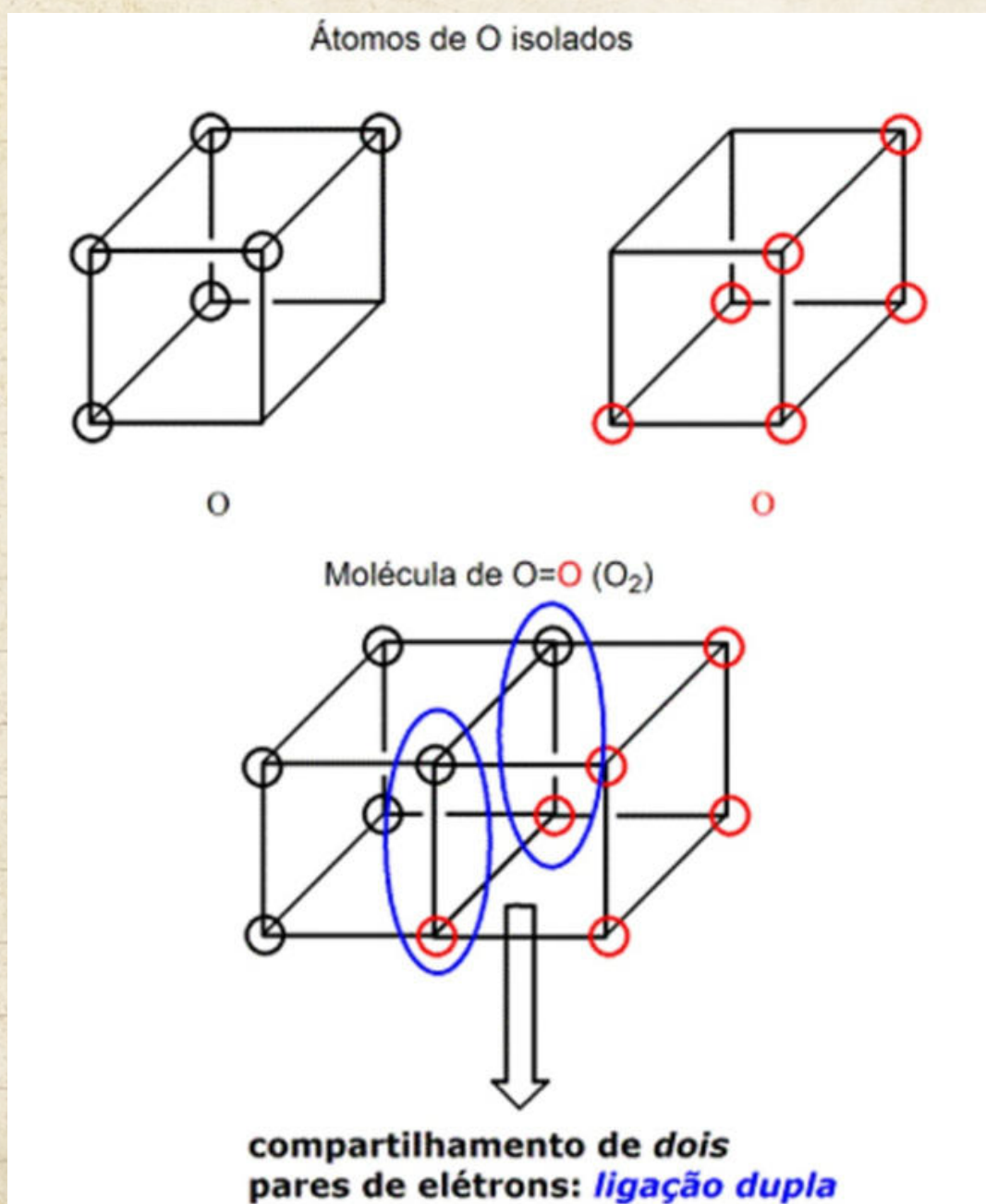


Na mesma publicação de 1916, Lewis demonstrou como ocorre a ligação das moléculas do  $\text{Cl}_2$ , onde somente os cubos externos são mostrados, pois são os elétrons de valência que determinam as ligações, completando sua camada externa com oito. A Figura abaixo mostra a estrutura química proposta por Lewis em sua publicação de 1916 para o gás cloro ( $\text{Cl}_2$ ).





Já a figura abaixo, mostra a proposta de Lewis para a ligação da molécula de gás oxigênio ( $O_2$ ), onde ocorre o compartilhamento de dois elétrons de valência, na mesma publicação de 1916. Este é um exemplo de uma ligação dupla entre os átomos.

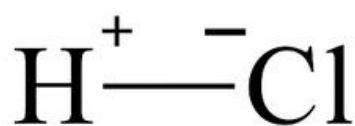




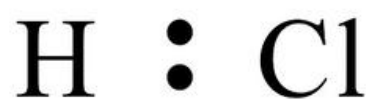
A teoria proposta por Lewis em 1916 foi a primeira teoria alternativa bem sucedida sobre a função dos elétrons na formação de uma ligação química apolar. Na teoria de Lewis sobre a ligação química, ele assumiu que em vez do elétron ser transferido completamente, como na teoria positivo-negativa, ocorria apenas uma transferência parcial, incompleta do elétron. Sendo assim, os átomos compartilhariam um par de elétrons entre si. A teoria de Lewis era mais ampla do que a teoria positivo-negativa, pois poderia ser aplicada eficientemente a compostos apolares, os quais não havia nenhuma indicação de formação de cargas nos átomos (BEZERRA, SILVA, 2001).



Lewis afirmava que sua teoria também poderia ser aplicada para explicar a formação de ligações em compostos polares, havendo uma certa carga residual. Para esse caso, em cada ligação formada, o par de elétrons ficaria mais próximo do átomo que possui maior força de atração. Assim, este átomo ficaria aparentemente negativo e o outro pareceria positivo, como mostra a figura abaixo. Dessa forma, a teoria positivo-negativa seria somente um caso especial da teoria de Lewis, que seria uma teoria mais completa (BEZERRA, SILVA, 2001).



(a)



(b)



Em 1916, os químicos reconheceram que muitos compostos possuíam um número par de elétrons externos (elétrons de valência). A tabela abaixo lista alguns exemplos (BEZERRA, SILVA, 2001).

Número de elétrons de valência em um átomo	Número de elétrons de valência na molécula
N = 5; H = 1	CH <sub>4</sub> = 8
C = 4; H = 1	CH <sub>4</sub> = 8
C = 4; O = 6	CO <sub>2</sub> = 16
S = 6; O = 6	SO <sub>3</sub> = 24
C = 4; Cl = 7	CCl <sub>4</sub> = 32



## 2.5 - Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons Livres (Modelo VSEPR)

Em 1940, o químico inglês Nevil Sidgwick (1873-1952) e o químico Hebert Marcus Powell (1906-1991) fizeram uma revisão sobre as estruturas das moléculas conhecidas até o momento e sugeriram que a geometria poderia ser prevista através do número de pares de elétrons na camada de valência do átomo central. Em 1957, o químico britânico Ronald James Gillespie (1924-2021) e o químico australiano Ronald Nyholm (1917-1971) repensaram a Teoria de Sidgwick e Powell, para a previsão das estruturas moleculares e dos ângulos de ligação a VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory) (KOTZ, 2005).



A VSEPR busca determinar qual a orientação mais estável dos pares eletrônicos em volta de um átomo central em uma molécula, prevendo a sua geometria. Segundo a teoria, os pares de elétrons da camada de valência (que estão carregados negativamente), permanecem separados, diminuindo as energias de repulsões existentes. A VSEPR ampliou a teoria da ligação química de Lewis e acrescentou as regras para explicar os ângulos de ligação entre o átomo central e os átomos ligantes (KOTZ, 2005).



Para explicar melhor a VSEPR, podemos determinar as geometrias moleculares utilizamos o modelo geral  $AX_nE_m$  para a identificação do átomo central, dos pares isolados e os átomos ligantes. A letra A representa o átomo central, a letra X representa o átomo ligante, a letra E um par isolado, já n e m são os índices que representam a quantidade de cada ligante e par isolado. Exemplo: a molécula do cloreto de berílio ( $BeCl_2$ ), que contém um átomo central, dois átomos ligados e nenhum par isolado, sendo assim uma espécie do tipo  $AX_2$ . (KOTZ, 2005).



Em alguns casos, como na molécula da amônia ( $\text{NH}_3$ ), espécie do tipo  $\text{AX}_3\text{E}$ , temos quatro pares de elétrons ligados ao átomo central de nitrogênio, e esperava-se que a geometria fosse do tipo tetraédrico, no entanto a geometria molecular descrita é pirâmide trigonal, pois a geometria molecular é o arranjo dos espaços do átomo central e dos átomos ligados diretamente a ele, ou seja, os pares isolados devem ser considerados mesmo não sendo incluído na descrição da forma da molécula ou do íon.



A tabela abaixo mostra os tipos de geometria molecular e também hibridização associada a elas.

Tipo de Molécula ou Íon	Forma Geométrica	Hibridização Associada
$AX_2$	Linear	$sp$
$AX_3$	Trigonal Plana	$sp^2$
$AX_2E$	Angular	$sp^2$
$AX_4$	Tetraédrica	$sp^3$
$AX_3E$	Piramidal	$sp^3$
$AX_2E_2$	Angular	$sp^3$
$AX_5$	Bipiramidal Trigonal	$sp^3d$
$AX_4E$	Tetraédrica Irregular (Gangorra)	$sp^3d$
$AX_3E_2$	Forma "T"	$sp^3d$
$AX_2E_3$	Linear	$sp^3d$
$AX_6$	Octaédrica	$sp^3d^2$
$AX_5E$	Piramidal de Base Quadrada	$sp^3d^2$
$AX_4E_2$	Quadrado Planar	$sp^3d^2$

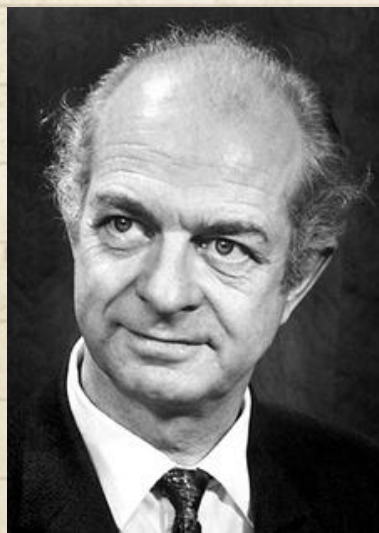


## **2.6 - Teoria da Ligação de Valência (TLV)**

**As décadas de 1930 e 1940 viram o desenvolvimento da Teoria da Ligação de Valência (TLV) e da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Linus Pauling (1901-1994) foi um dos cientistas interessados em mecânica quântica para explicar as ligações químicas. O cientista recebeu um bolsa de pesquisa para estudar na Europa, onde teve contato com Arnold Sommerfeld (1868-1951), Niels Bohr (1885-1962), Walter Heitler (1904-1981) e Fritz London (1900-1954), sendo os últimos que apresentaram o estudo de tratamento da molécula de hidrogênio por mecânica quântica (PATROCINIO, et al, 2020).**



Quando retornou aos Estados Unidos, Pauling direcionou seus estudos para ligações químicas propondo a TLV, que introduziu esses conceitos quânticos como: geometrias moleculares em termos de superposição, ressonância e hibridização de orbitais. Contudo, sem uma abordagem complexa da matemática. Para ele, as ligações químicas ocorriam por superposição de orbitais atômicos ocupados por elétrons de spins opostos, sendo assim uma teoria intermediária para a teoria de Lewis e os conceitos da mecânica quântica (PATROCINIO, et al, 2020).



Químico quântico e bioquímico Linus Pauling.



A TLV foi a primeira teoria que introduziu conceitos da mecânica quântica desenvolvida para a ligação química. A linguagem introduzida por ela, envolvendo conceitos como emparelhamento de spins, superposição de orbitais, ligação  $\sigma$ , ligação  $\pi$  e hibridização é bastante utilizada na química, especialmente na descrição das propriedades e das reações dos compostos orgânicos. Na teoria, considera-se que uma ligação é formada quando um elétron em um orbital atômico de um átomo emparelha o seu spin com o de um elétron de spin oposto em um orbital atômico de outro átomo (SILVA, 2020).



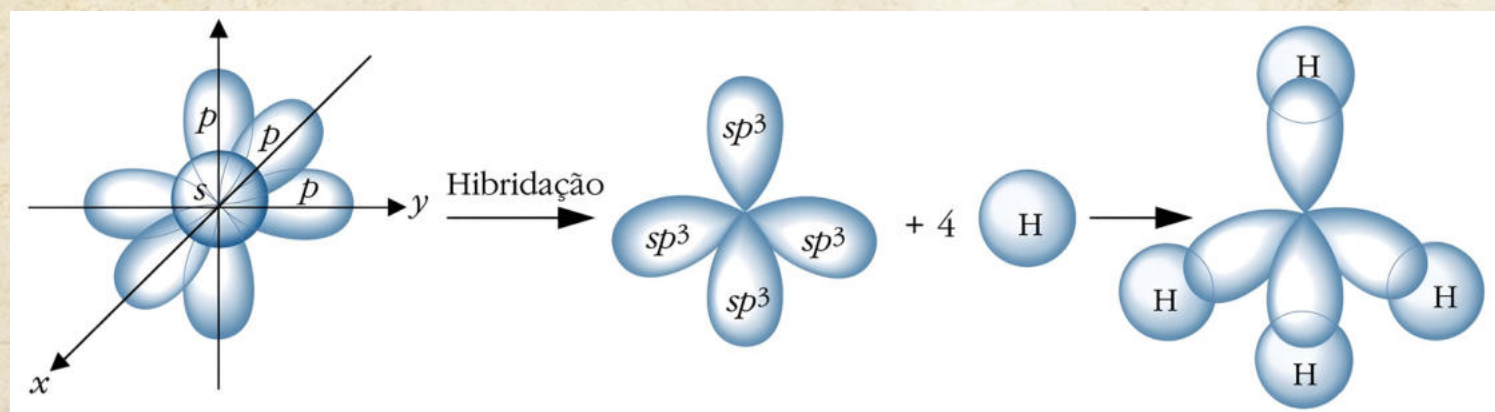
A base conceitual da teoria da ressonância estava definida, permitindo a explicação de diversos fenômenos químicos com fundamento na movimentação das estruturas eletrônicas e na dinâmica das ligações dentro dessas estruturas. Na aplicação da teoria da ressonância à mecânica quântica, se for possível descrever uma molécula (ou outro sistema) por meio de duas ou mais estruturas eletrônicas com energias aproximadamente equivalentes e que satisfaçam determinadas condições, nenhuma dessas estruturas, isoladamente, pode ser considerada como a representação exata do estado fundamental da molécula (SILVA, 2020).



Em vez disso, o estado real da molécula é melhor descrito como uma combinação dessas estruturas, resultando em uma configuração híbrida. Esse fenômeno confere à molécula maior estabilidade, uma vez que seu conteúdo energético é menor do que seria caso adotasse qualquer uma das estruturas individualmente. O processo pelo qual a molécula alterna entre essas diferentes configurações é chamado de ressonância, e a energia associada à sua estabilização é conhecida como energia de ressonância (SILVA, 2020).



A Figura abaixo traz uma descrição via TLV para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ) através da combinação de três orbitais p e um orbital s, para formar quatro orbitais híbridos  $sp^3$  e a representação da interpenetração do orbital  $1s$  de quatro átomos de hidrogênio com os orbitais  $sp^3$  do carbono, para formar o metano ( $\text{CH}_4$ ). Vale ressaltar que além da  $sp^3$  existem outros tipos de hibridização entre orbitais.





## 2.6 - Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM)

A TOM (segunda teoria baseada na mecânica quântica), foi desenvolvida por Friedrich Hund (1896-1997), Robert Mulliken (1896-1986) e outros cientistas a partir da determinação de espectros moleculares e aprofundamento de abordagens matemáticas. A teoria definia que a ligação química entre átomos podia ocorrer pela combinação de orbitais atômicos descritos por funções de onda, gerando orbitais moleculares de energia menor do que os dos orbitais atômicos de origem. A TOM recebeu maior notoriedade por seus cálculos e também por conseguir explicar moléculas mais complexas (PATROCINIO, et al, 2020).



De maneira geral, um orbital molecular de uma molécula AB ( $\Psi_{AB}$ ) pode ser descrito por uma combinação linear (soma ou diferença) dos orbitais atômicos localizados em A e em B, respectivamente ( $\Psi_{AB} = c_A \Psi_A \pm c_B \Psi_B$ ). Essa combinação dos orbitais pode ocorrer em proporções variáveis, expressas pelos coeficientes  $c_A$  e  $c_B$ . Quando os orbitais são equivalentes, como os orbitais 1s na molécula de H<sub>2</sub>, esses coeficientes são iguais, isto é,  $c_A = c_B$ . Os coeficientes diferenciam-se cada vez mais à medida que aumenta a diferença de energia entre os orbitais (TOMA. 1997).



Quando  $c_A \gg c_B$ , a participação do  $\Psi_A$  é dominante e o orbital molecular  $\Psi_{AB}$  se assemelha a  $\Psi_A$  e vice-versa. Isso quer dizer que os elétrons não são compartilhados igualmente, podendo ficar a maior parte do tempo em A ou em B, dependendo dos valores relativos de  $c_A$  e  $c_B$ . Isso está relacionado com a diferença de eletronegatividade entre os elementos químicos participantes (TOMA. 1997).

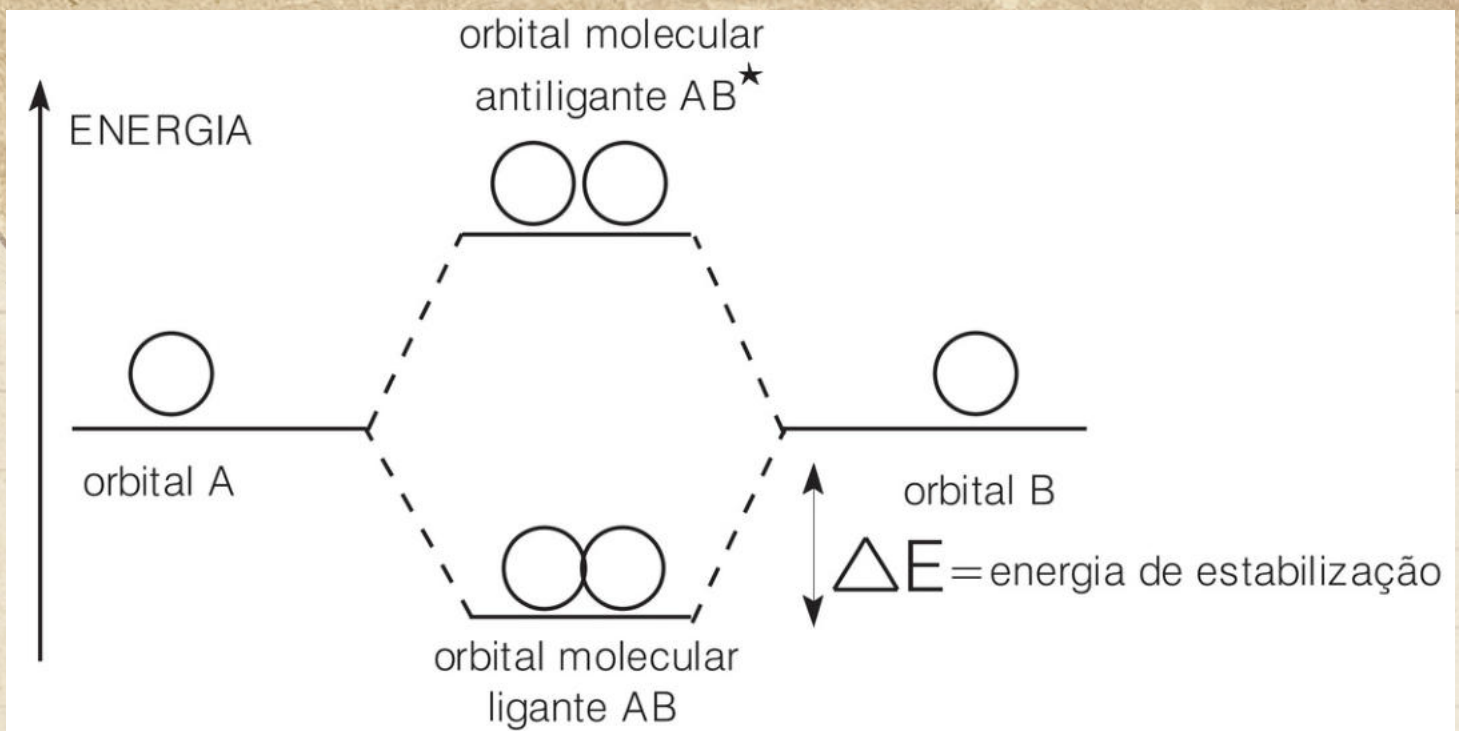
Na mecânica quântica, as energias são calculadas por meio da equação de Schrödinger, cuja representação genérica é do tipo  $H\Psi_{AB} = E\Psi_{AB}$ , sendo H, conhecido como operador hamiltoniano, uma expressão matemática dos termos energéticos da molécula, englobando por exemplo a energia cinética dos elétrons, a atração dos núcleos pelos elétrons de ligação, a repulsão entre os elétrons e a repulsão internuclear (TOMA. 1997).



A solução da equação de Schrödinger sempre leva a dois valores de energia,  $E^+$  e  $E^-$ , que estão associados às combinações, por soma ou diferença dos orbitais atômicos (TOMA. 1997).

A solução  $E^+$ , de menor energia, provém da combinação dos orbitais atômicos com o mesmo sinal, formando um orbital molecular denominado ligante, levando à estabilização da molécula. A solução  $E^-$  provém da combinação dos orbitais atômicos com sinais opostos, produzindo um orbital molecular de maior energia denominado antiligante. Uma ilustração desses orbitais pode ser visualizada na figura da próxima página (TOMA. 1997).

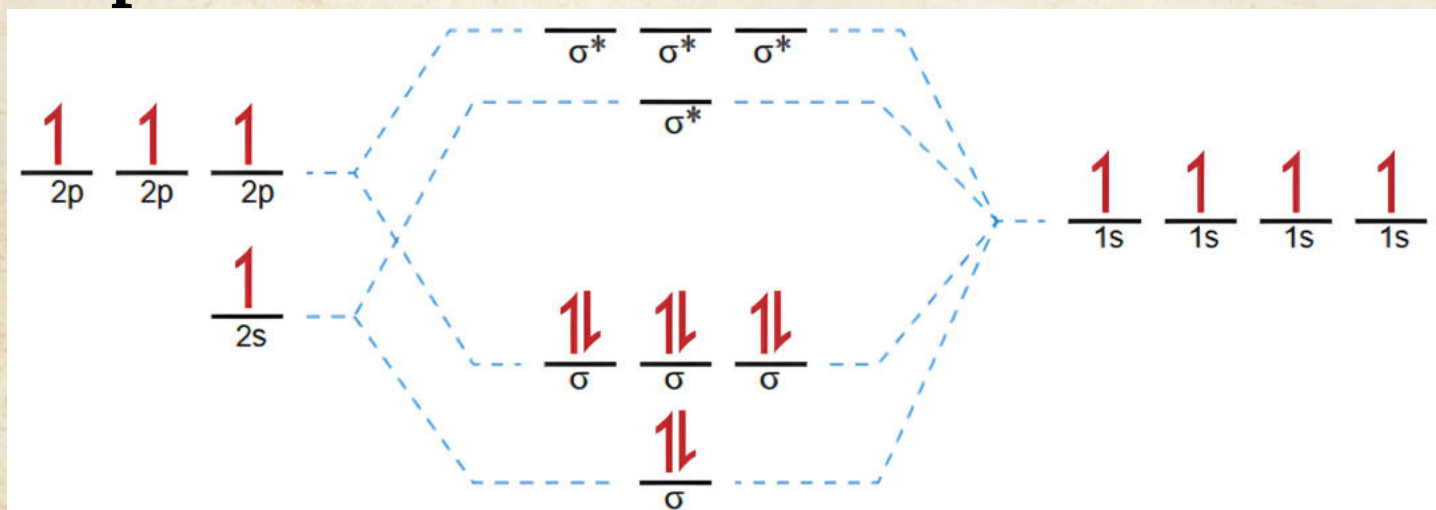




O diagrama de energia dos orbitais moleculares indica que a formação da ligação química está relacionada à estabilização da molécula, que é proporcionada pelo preenchimento do orbital ligante (menor energia). Quando temos elétrons nos orbitais antiligantes (maior energia), diminuimos essa estabilização (TOMA. 1997).



A figura abaixo traz uma descrição via TOM para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ), sendo cada seta de cor vermelha a representação de um elétron em seu respectivo orbital.



Percebe-se na imagem que há um elétron do carbono em 2s e três elétrons em 2p, contudo, pode-se considerar que acontece a hibridização ou hibridação entre os orbitais s e p do carbono para formar quatro orbitais  $\text{sp}^3$ , que interpenetram o orbital 1s de quatro átomos de hidrogênio para formar o metano ( $\text{CH}_4$ ).



## 2.7 - Teoria do Loge

No final da década de 1950 os únicos métodos de cálculos químico quânticos existentes eram o método da ligação de valência e o método dos orbitais moleculares de Huckel. A década de 1950 marcou o início da aplicação da mecânica ondulatória na Química e foi nesse período que o físico francês Raymond Daudel (1920-2006) iniciou seus estudos sobre a natureza da ligação química.



Físico francês Raymond Daudel.



Em 1952 Daudel definiu a densidade diferencial de elétrons, grandeza calculada a partir das funções de onda que representam os orbitais atômicos e que poderia ser avaliada experimentalmente por técnicas de difração de nêutrons e de elétrons (SANDORFY, 1985). Essa definição foi uma importante contribuição de Daudel para o estudo da ligação química.

Em 1953, Daudel fez o que é considerada sua maior contribuição na Química Quântica, ele definiu o “Loge” como sendo o espaço onde existe alta probabilidade de encontrar um número “n” de elétrons. Daudel usava a probabilidade próxima a 90%. Dentre as teorias que procuram descrever a ligação química, a Teoria do Loge é a mais utilizada quando se aplica a Teoria da Informação no estudo de moléculas (NALEWAJSK, 2003).



Em seu artigo "About the Nature of the Chemical Bond" (1992), Daudel relaciona o Loge para dois elétrons com spins contrários à densidade eletrônica entre dois núcleos e encontra uma relação semelhante à lei de Boyle-Mariotte para os gases. Ele destaca que esse fato não deve ser coincidência por que nuvens de elétrons podem ser tratadas como gases.

Em seu livro "Quantum Theory of the Chemical Bond" (1974) (DAUDEL, 1974), Daudel descreve a Teoria do Loge, suas definições, fundamentos e todo o formalismo matemático necessário inclusive para as funções de onda associadas ao Loge, além de aplicações para moléculas e íons com as implicações na reatividade das espécies.



É importante destacar que a Teoria do Loge surgiu do grupo ao qual pertencia o físico Louis de Broglie, descobridor da dualidade onda-partícula e ganhador do Prêmio Nobel de Física de 1929 e que segundo Adrien Vila-Valls em sua tese de doutorado intitulada “Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France (1925-1960)” (2012) cabia à Raymond Daudel a aplicação da Mecânica Ondulatória à Química (Pág. 196).

As ideias originadas no grupo de Louis de Broglie se espalharam pelo mundo e chegaram ao Brasil. O Prof. Daudel foi orientador no doutorado do Prof. Milan Trsic (1937-2020) que foi professor do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo–USP.



**Trsic formou diversos mestres e doutores sempre atuando na Química Teórica através do desenvolvimento de métodos de cálculo e aplicações a diversos tipos de sistemas atômicos e moleculares.**



**Professor Milan Trsic.**



# Referências

ABRANTES, P. C. C. Imagens de natureza e imagens de ciência. Campinas: Papirus, 1998.

BENSAUDE-VINCENT, B.; STENGERS, I. História da química. Lisboa: Instituto Piaget, 1992.

BEZERRA, A. S; SILVA, R. R. Ligações químicas: as primeiras teorias. Educación química. México. 12, (3) 179-183. 2001. Disponível em: <https://revistas.unam.mx/index.php/reg/article/view/66346>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

COFFEY, P. Cathedrals of science: The personalities and rivalries that made modern chemistry. Oxford University Press, 2008.

DAUDEL, Raymond. Quantum theory of the chemical bond. D. Reidel Publishing Company, 1974.

DAUDEL, Raymond. About the nature of the chemical bond. Journal of molecular structure. Theochem, v. 261, p. 113-114, 1992. Disponível em: [About the nature of the chemical bond \(inist.fr\)](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.

FERNANDEZ, C.; MARCONDES, M. E. Concepções dos estudantes sobre ligação química. Química Nova na Escola, v. 24, p. 20-24, 2006. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc24/af1.pdf>. Acesso em: 26 de jul. 2024.

FILGUEIRAS, L. A. C. Gilbert Lewis e o centenário da teoria de ligação por par de elétrons. Química Nova na Escola, Vol. 39, No. 10, 1262-1268, 2016. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/MycQJGRnj35mmvQWcsFx7zD/> . Acesso em: 26 de jul. 2024.

IHDE, A. J. The development of the modern chemistry. New York: Dover publications, 1984.



JUSTI, R. S.; A afinidade entre as substâncias pode explicar as reações químicas? Química Nova na Escola. n.7, p.26-29, Maio, 1998.

Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc07/historia.pdf>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

KOTZ, John C. Química geral e reações químicas. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2005.

LAIDLER, K. J. The world of physical chemistry. Oxford: Oxford University Press, 1993.

NALEWAJSKI, Roman F. Princípios de informação na teoria de loge. Chemical physics letters , v. 375, n. 1-2, p. 196-203, 2003. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261403008029>. Acesso em: 04 de mar. 2025.

NAVARRO, M., FÉLIX, M., MILARÉ, T. A História da Química em livros didáticos do Ensino Médio. Revista Ciência, Tecnologia & Ambiente, v. 1, n. 1, 2015. Disponível em:

<https://www.revistacta.ufscar.br/index.php/revistacta/article/view/12>. Acesso em: 01 de dez. 2023.

PATROCÍNIO, Analouise Almeida do et al. O Desenvolvimento histórico do conceito de ligação química. Trabalho apresentado em anais do 20º Encontro Nacional de Ensino de Química (ENEQ Pernambuco). Anais de Recife (PE) UFRPE/UFPE, 2020. Disponível em: <https://www.even3.com.br/anais/enegpe2020/245145-o-desenvolvimento-historico-do-conceito-de-ligacao-quimica/>. Acesso em 29 de jul. 2024.

SANDORFY, C. Professor Raymond Daudel. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, v. 123, n. 3-4, p. 165-169, 1985.

SILVA, M. A. S. Teoria do orbital molecular: uma proposta de aplicação no ensino médio de química. 2020. 94 f. Dissertação (Programa de Mestrado Profissional em Química), Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2020.



TOMA, H. E. Ligação química: abordagem clássica ou quântica?. Química Nova na Escola, v. 6, n. 2, p. 8-12, 1997. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc06/conceito.pdf>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

VILA-VALLS, Adrien. Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France (1925-1960). 2012. Tese de Doutorado. Université Claude Bernard-Lyon I. Disponível em: [Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France \(1925-1960\) - TEL - Thèses en ligne \(hal.science\)](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.