

MODELOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA: UMA DISCUSSÃO FILOSÓFICA

*Uarison Rodrigues Barreto¹ (PG) (uarisonbarreto@gmail.com), Nelson Rui Ribas Bejarano² (PQ)

¹ Doutorando no Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia (UFBA), Universidade Estadual de Feira de Santana (UEFS), Campus Universitário de Ondina, CEP: 40210-340, Salvador – Ba.

² Pesquisador, Professor Associado IV do Departamento de Química Geral e Inorgânica, Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, Universidade Federal da Bahia (UFBA), Universidade Estadual de Feira de Santana (UEFS), Campus Universitário de Ondina, CEP: 40210-340, Salvador – Ba.

Resumo: Esta pesquisa tem como objetivo caracterizar a forma como modelos explicam a natureza da ligação covalente, especialmente o tratamento que os livros didáticos de química dão ao tratar das explicações fornecidas pelos modelos de Gilbert Newton Lewis, da Ligação de Valência e do Orbital Molecular. Trata-se de uma pesquisa qualitativa, na qual foram selecionados oito livros didáticos de química do ensino universitário. Os resultados apontam para um tratamento indiscriminado das perspectivas teóricas, ora denominando-as como modelo, ora como teoria e ora como modelo/teoria. Considerando os livros como indicadores do que ocorre na sala de aula, a falta de clareza epistemológica sobre modelos/teorias pode levar professores e estudantes a acreditarem que na ciência, esses conceitos sejam idênticos, o que é um equívoco. A noção de modelo é defendida como possibilidade para todas essas perspectivas teóricas que explicam o fenômeno da ligação química.

Palavras – chave: Filosofia da Química, Modelos, Teorias.

INTRODUÇÃO

A ligação química é um dos conteúdos centrais do conhecimento químico. Assim, desde as estruturas químicas até as reações químicas, encontra-se presente o papel explicativo da ligação química. Nesse sentido, são encontrados diversos enfoques teóricos, desde a noção clássica de Gilbert Newton Lewis, a qual sugere que o par de elétrons é fundamental para ligar dois átomos, formando uma ligação covalente, até as divergentes concepções da Mecânica Quântica: o Modelo da Ligação de Valência e o Modelo do Orbital Molecular.

Neste trabalho, sustentamos que o caso da ligação covalente serve bem para pensarmos sobre a coexistência de três explicações científicas distintas que tratam de um mesmo fenômeno. Diante disso, questionamos: Por que três perspectivas teóricas distintas concorrem para explicar um mesmo fenômeno? Essa tensão entre as três perspectivas parece manifestar um problema conceitual profundo sobre a natureza da ligação química, já que as mesmas apresentam diferenças ontológicas e, sobretudo, em relação aos seus aspectos teórico-conceituais. Frente a este problema químico, buscamos estudá-lo utilizando como referenciais, as posições teóricas de Agustín Adúriz-Bravo, Margaret Morrison, Mary Morgan e Ronald Giere. Portanto, esta pesquisa tem por objetivo caracterizar a forma como modelos explicam a natureza da ligação covalente, especialmente o tratamento que os livros didáticos de química do nível superior dão ao tratar dos modelos de Gilbert Newton Lewis (LEWIS), da Ligação de Valência (LV) e do Orbital Molecular (OM).

RELAÇÃO MODELO, TEORIA E REALIDADE

O termo *modelos* assume na filosofia da ciência um vocábulo polissêmico (cf. ADÚRIZ-BRAVO, 2001; GUTIÉRREZ, 2005, OH, OH, 2011). Segundo estes autores, a polissemia acerca da noção de modelos tornou-se um obstáculo no ensino de ciências.

Adúriz-Bravo (2012), acrescenta que esta polissemia persiste ao longo do tempo, se constituindo como um obstáculo também no campo da ciência.

Para entender a relação estreita dos modelos com as teorias, Adúriz-Bravo (2012) sugere a necessidade de recorrermos a algumas caracterizações da ideia de modelo científico propostas pela epistemologia do século XX. Nesse sentido, o autor considera três grandes concepções: (1) Para o positivismo lógico e a concepção herdada (1920 –1960), um modelo científico é um exemplo qualquer de uma teoria; considera-se a teoria como entidade central para as análises epistemológicas; (2) Para a nova filosofia da ciência (1950 – 1980), o modelo se converteu em um exemplo paradigmático (isto é, digno de imitação) de uma teoria; (3) Por último, para a concepção semântica das teorias científicas (1970 até hoje), o modelo está identificado com um exemplo intencionado da teoria (isto é, um exemplo que a teoria está interessada em explicar) (ADÚRIZ - BRAVO, 2011).

Para este autor, a mais influente corrente filosófica, a concepção sintática ou (herdada) das teorias científicas, dos anos 50 e 60 estudou de forma profunda os aspectos lógicos e linguísticos do conhecimento científico. De acordo com os epistemólogos desta escola, as teorias empíricas eram baseadas em cálculos axiomáticos “interpretados” (com base na lógica formal). Nesse contexto, um modelo era uma entidade de menor interesse, podendo ser reduzido a um sistema (estrutura) que satisfizesse todos os axiomas das teorias científicas, convertendo-se em modelo dessa teoria depois deste processo de interpretação (DIEZ, MOULINES, 1999). Com o surgimento da nova filosofia da ciência nos anos 60 e 70, Thomas Kuhn, propôs centrar-se na ideia de modelo, uma vez que, ele acreditava ser o modelo, central para o entendimento do funcionamento do empreendimento científico. Na concepção semântica, dos anos 70 e 80, os modelos são o centro de parte explicativa de uma teoria; constituindo-se em um conjunto ou classes de modelos que podem ser caracterizados pelas leis científicas (os axiomas) dessa teoria científica, conforme apontam Diez e Moulines (1999).

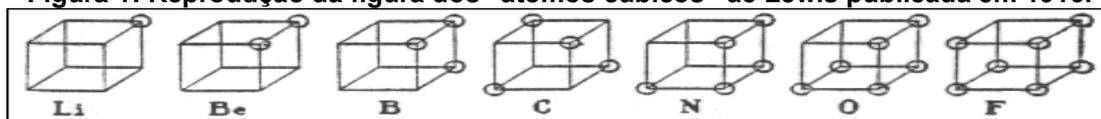
Diante do exposto, entendemos que teorias, têm sido compreendidas, nos últimos 50 anos, como sistemas de conhecimento. Ou seja, uma teoria é um sistema formado por um conjunto de enunciados, leis, pressupostos, postulados e modelos. Nesse sentido, uma teoria deve ter capacidade de explicação teórica (que é uma característica epistêmica central para a ciência), isto é, ela deve ser capaz de explicar a maior parte do seu domínio que tenta investigar; de maneira que não deva apenas descrever, prever e explicar um caso particular, mas um conjunto de casos. Enquanto que, modelos são estruturas fundamentalmente representacionais, desenvolvidas com descrições aproximadas, mais limitadas, podendo ser alargada para outros casos. Amparados por Giere (1992, 1999, 2004) e Chamizo (2006) argumentamos que modelos são distintos da realidade; nunca são a realidade e nem devem ser, pois um modelo que tenta ser a realidade, não é mais um modelo, mas uma descrição do real. Nessa perspectiva, modelos mostram o que é teoricamente possível e não o que é a realidade.

O MODELO DE LEWIS PARA A LIGAÇÃO COVALENTE

Gilbert Newton Lewis (1875-1946) desenvolveu seu modelo anos antes do surgimento da mecânica quântica e do conceito de orbital. Em 1902, propôs o chamado “átomo cúbico”, mas não publicou. De acordo com Gugliotti (2001, p. 2), “Lewis imaginava um átomo estático, com os elétrons arranjados em camadas cúbicas em torno do núcleo.” Em 1916, Lewis publicou seu trabalho intitulado “The atom and the molecule”, que buscava explicar a valência e fez uma descrição da sua ideia de

estrutura atômica (“átomo cúbico” – Figura 1). Assim, os círculos representam os elétrons na camada externa, conforme a seguir:

Figura 1: Reprodução da figura dos “átomos cúbicos” de Lewis publicada em 1916.



Fonte: LEWIS, G. N. (1916). The atom and the molecule. Journal of the American Chemical Society 38: 762-785.

Lewis acreditava na existência de uma única causa fundamental para as diversas combinações químicas: o “fenômeno fundamental” numa ligação química era o emparelhamento de elétrons e isto se manifestava pelo número par de elétrons na camada de valência (DAVANZO & CHAGAS, 1993, p. 153). Em 1923, publicou um livro intitulado: “Valence and the Structure of Atoms and Molecules”. Nesse trabalho, Lewis faz uma revisão sobre suas próprias ideias sobre a estrutura atômica, o que o leva a estabelecer um construto mais sólido para seu modelo. É nessa obra que o químico reforçou a importância do par eletrônico na formação da ligação química como algo mais fundamental do que propusera em 1916. Assim, construiu sua ideia de ligação química, considerando alguns resultados publicados, sobretudo, por Langmuir (1919) e Bohr (1913 e 1921) acerca da estrutura dos átomos. Com isso, abandonou sua ideia de “átomo cúbico” e passou a utilizar a ideia de camadas eletrônicas de acordo com o modelo de Bohr. Porém, o modelo de Lewis tem diversas dificuldades explicativas, entre elas: é incapaz de explicar a importância dos pares de elétrons na formação da ligação covalente; Lewis não entendia por que os elétrons em moléculas pareciam ser encontrados em pares; entre outros.

O MODELO DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA

O Modelo da Ligação de Valência surgiu de um artigo publicado por Walter Heitler e Fritz London em 1927. Sua abordagem foi desenvolvida por Slater (1929) e mais extensamente por Linus Pauling (1931). Aqui, temos a primeira aplicação da mecânica quântica a um sistema molecular, nesse caso para a molécula de H_2 . A generalização de moléculas poliatômicas ocorreu através dos trabalhos de John C. Slater (1930), do Prêmio Nobel Linus Pauling (1931, 1939), entre outros autores. Este modelo é a primeira descrição da ligação covalente em termos de orbitais atômicos, uma forma aproximada para resolver a equação de Schrödinger.

Mas, o que acontece, contudo, se dois átomos de hidrogênio a uma distância infinita forem aproximados para formar uma ligação? A figura 2 a seguir, ilustra a variação da sobreposição de orbitais para molécula de H_2 :

Figura 2: Variação da energia potencial durante a formação da ligação H - H a partir de átomos de hidrogênio isolados. A energia mais baixa é atingida com uma separação H - H de 74 pm, em que a sobreposição dos orbitais 1s ocorre. As distâncias maiores a sobreposição é menor, e as ligações são mais fracas. As distâncias H - H menores que 74 pm, as repulsões entre os núcleos e entre elétrons dos átomos aumentam rapidamente, e a curva da energia potencial sobe de modo íngreme. Assim, espera-se que uma molécula H_2 seja menos estável quando a distância entre os átomos é muito pequena.



Fonte: BROWN, T. L.; LEMAY, H. E. Jr; BURSTEN, B. E.; BURDGE, J. R. Química – A ciência central. 9.ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005. 972p.

A curva descreve a situação quando os dois orbitais 1s dos átomos de H se aproximam. Os elétrons que compõem o par compartilhado entre átomos adjacentes obedecem ao Princípio de Exclusão de Pauli, isto é, estão emparelhados, tendo spins opostos. De acordo com este modelo, um par de elétrons pode simultaneamente ocupar os orbitais de dois átomos somente se existir significativa sobreposição no espaço, assim como ocorre na formação da molécula de H₂ ilustrada na figura 2. Nessa figura, a distância entre os átomos de hidrogênio é igual a 74 picômetro, a energia potencial atinge um mínimo e a molécula de H₂ é mais estável. Para o modelo da Ligação de Valência, cada átomo H tem sua própria região de orbitais. A seguir, a função de onda para a molécula de hidrogênio:

$$\Psi_{(LV)} = \Psi_{A(1)B(2)} + \Psi_{A(2)B(1)}$$

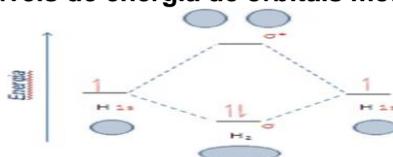
De acordo com equação, os elétrons são representados por 1 e 2, e A e B representam átomos de hidrogênio. Outro conceito importante é o de hibridização introduzido por Pauling. Para este autor, a hibridização diz que os orbitais puros podem se fundir para formar novos orbitais, os orbitais híbridos, menos energéticos e, portanto, mais estáveis. Verifica-se, portanto, que o Modelo da Ligação de Valência não prevê a forma molecular, mas apenas fornece um método para descrever a ligação em termos da sobreposição de dois orbitais adequados quando a geometria é conhecida. Este modelo, assim como o modelo de Lewis tem limitações, pois é incapaz de prevê e explicar propriedades de algumas moléculas, por exemplo, o paramagnetismo do oxigênio.

O MODELO DO ORBITAL MOLECULAR

O Modelo dos Orbitais Moleculares foi introduzido pelo químico Robert Mulliken (1928) e Friedrich Hund, com contribuições de outros autores. Um dos maiores triunfos deste modelo foi a sua capacidade de demonstrar que a molécula de O₂ é paramagnética; quando submetida à ação de um campo magnético externo, a molécula é atraída em direção ao campo. Este é o grande contraste com o Modelo da Ligação de Valência, que leva à estrutura de Lewis (:Ö::Ö:) e não explica o paramagnetismo da molécula de oxigênio.

Diferentemente dos Modelos de Lewis e da Ligação de Valência, onde os elétrons estão localizados em átomos ou entre pares de átomos, aqui todos os elétrons de valência estão deslocalizados sobre toda a molécula. Este modelo descreve os elétrons nas moléculas utilizando funções de onda chamadas Orbitais Moleculares (OM). A ligação covalente é agora descrita em termos de orbitais moleculares distribuídos por toda a molécula de maneira que um orbital molecular Ψ é explicado em termos de uma Combinação Linear de Orbitais Atômicos (LCAO). Assim, quando os átomos se aproximam e seus orbitais atômicos se superpõem, formam-se dois orbitais moleculares: o σ -orbital ligante, menos energético que os orbitais atômicos, que tende a estabilizar a ligação química, enquanto que o σ^* orbital antiligante, mais energético, tende a desestabilizá-la. A seguir, a figura 3 representa o diagrama de níveis de energia de orbitais moleculares da molécula de H₂:

Figura 3: Diagrama de níveis de energia de orbitais moleculares da molécula de H₂.



Fonte: <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?p=582>.

Os cálculos para essa situação pode ser obtido da mecânica quântica, mas,

para isso, será necessária a utilização de funções de onda que descrevem elétrons 1 e 2 em torno aos núcleos X e Y, propostos conforme as equações a seguir:

$$\Psi_a = \Psi_{X(1)} \cdot \Psi_{Y(2)} + \Psi_{X(2)} \cdot \Psi_{Y(1)} \text{ (representa orbital ligante)}$$

$$\Psi_s = \Psi_{X(1)} \cdot \Psi_{Y(2)} - \Psi_{X(2)} \cdot \Psi_{Y(1)} \text{ (representa orbital antiligante)}$$

Ademais, a estabilidade da molécula de hidrogênio, por exemplo, pode ser explicada de forma que sua energia é menor em relação aos átomos separados. Outro conceito que faz parte do Modelo do Orbital Molecular é a Ordem de Ligação (OL), a qual se refere à força de uma ligação química. Portanto, este modelo surge como uma melhor alternativa para os limites apresentados ao Modelo de Lewis, sendo mais facilmente utilizada nos cálculos do que o Modelo da Ligação de Valência, conforme apontam Atkins e Jones (2006). Porém, assim como os modelos anteriores, o Modelo do Orbital Molecular também apresenta dificuldades explicativas, por exemplo, ele possui falhas quando tentar aplicar as ligações no estado sólido.

DELINEAMENTO METODOLÓGICO

A presente pesquisa foi realizada através do método qualitativo (CRESWELL, 2007), constituindo-se de um estudo exploratório, descritivo, compreensivo, configurando-se como análise de documentos – os livros didáticos. Aplicamos a técnica da análise temática (BARDIN, 1977) para análise dos dados, que procederam em três etapas: pré-análise, exploração do material e tratamento e interpretação dos dados obtidos. Os livros didáticos de química foram escolhidos a partir de uma breve consulta aos professores do Instituto de Química da Universidade Federal da Bahia, que ensinam os conteúdos para os cursos de química e para vários outros cursos de ciências exatas da universidade, os quais indicaram os livros escolhidos. Assim, dos 11 docentes, 6 indicaram 6 livros, sendo que todos indicaram os mesmos livros; 2 docentes sugeriram os 6 livros já indicados, mais a inclusão de 2 livros e 3 docentes indicaram 3 livros que já haviam sido indicados por outros docentes. Dessa forma, chegou-se ao corpus da pesquisa – 8 livros didáticos de química. Analisou-se, portanto, os livros didáticos a luz da categoria temática: Relação modelo/teoria e explicação química.

COLETA DE DADOS

Para realizar esse estudo, adotamos como objeto de coleta de dados os livros didáticos. Optou-se pela escolha exclusivamente de livros didáticos de nível superior. Assim, buscamos analisar os livros mais utilizados na graduação em química que abordam as perspectivas teóricas investigadas no nível de química geral. Nessa perspectiva, foram contatados 11 docentes do Departamento de Química Geral e Inorgânica da Universidade Federal da Bahia, os quais indicaram os livros didáticos escolhidos para a pesquisa, de acordo com o quadro 1:

Quadro 1: Livros didáticos de química selecionados para a pesquisa.

Ano	Livros Didáticos	Autores (as)	Edição	Nível	Código
2006	Princípios de Química Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente	Atkins, Jones	3ª	Superior	LD1
2005	Química, A Ciência Central	Brown, Lemay, Bursten, Burdge	9ª	Superior	LD2

2009	Química Geral e Reações Químicas	Kotz, Treichel, Weaver	6 ^a	Superior	LD3
2011	Química	Masterton, Slowinski, Stanitski	6 ^a	Superior	LD4
1994	Química Geral	Chang	5 ^a	Superior	LD5
1994	Química Geral	Russell	2 ^a	Superior	LD6
1986	Química	Brady, Humiston	2 ^a	Superior	LD7
1979	Química	Quagliano, Vallarino	3 ^a	Superior	LD8

Fonte: Elaboração dos autores.

ANÁLISES DOS LIVROS DIDÁTICOS: LIVRO DIDÁTICO 1 (LD1)

Atkins e Jones iniciam o capítulo 3, intitulado “Forma e Estrutura das Moléculas”, apresentam os modelos da Ligação de Valência e do Orbital Molecular: “Os outros dois modelos são mais bem elaborados. Essas teorias descrevem a distribuição dos elétrons e sua participação na determinação da forma da molécula” (ATKINS & JONES, 2006, p.197).

Verifica-se que os autores fazem uso dos termos teorias e modelos de forma indiscriminada. Sendo que no início do texto, apresentam o tratamento das perspectivas da LV e OM como modelos e, logo após, apresentam como teorias. Contudo, tais perspectivas são tratadas como modelos/teorias. Ainda, nessa perspectiva, Atkins e Jones, ao tratar da LV, enfatizam: “Ela é chamada de **teoria da ligação de valência** (teoria VB). Esta teoria é um modelo quântico da distribuição dos elétrons pelas ligações que ultrapassa a teoria de Lewis” (ATKINS & JONES, 2006, p.208). Constata-se que Lewis ora é tratado como teoria, ora como modelo, conforme a seguir: “no modelo de Lewis das ligações químicas, cada par de elétrons ligantes está localizado entre dois átomos ligados, isto é, trata-se de um modelo com os elétrons localizados” (ATKINS & JONES, 2006, p.206). Verifica-se, de forma clara, que todas as perspectivas são tratadas como modelos/teorias.

LIVRO DIDÁTICO 2 (LD2)

Em relação à perspectiva de Lewis, os autores afirmam: “a teoria de Lewis, a ligação covalente ocorre quando os átomos compartilham elétrons” (BROWN, LEMAY, BURSTEN & BURDGE, 2005, p.303). Assim, verifica-se que Lewis é tratado como teoria. Já no capítulo 9 denominado “Geometria molecular e teorias de ligação”, no início do capítulo em “O que está por vir”, os autores alegam:

Examinaremos a teoria de ligação de valência, um modelo de ligação molecular que nos ajuda a entender por que as moléculas formam ligações e por que têm as formas espaciais que têm.

Finalmente, abordaremos a teoria do orbital molecular, um modelo de ligação química que favorece compreensão mais clara da estrutura eletrônica das moléculas (BROWN, LEMAY, BURSTEN & BURDGE, 2005, p.289).

Os autores ao tratarem das perspectivas da Ligação de Valência e do Orbital Molecular, fazem o uso dos termos modelos e teorias de forma indiscriminada; ora apresentam como modelos ora como teorias, ou seja, tais perspectivas são tratadas como modelo/teoria.

LIVRO DIDÁTICO 3 (LD3)

No LD3, os autores ao comentarem sobre as “perspectivas históricas” alegam que: “Gilbert Newton Lewis (1875 – 1946) introduziu a teoria da ligação química através de pares de elétrons compartilhados” (KOTZ, TREICHEL & WEAVER, 2009, p. 362). Verifica-se que os autores apresentam Lewis como teoria. Porém, quando tratam da LV, apresentam Lewis como modelo, conforme a seguir: “colocar os elétrons entre os núcleos também iguala o modelo de Lewis para os elétrons” (KOTZ, TREICHEL & WEAVER, 2009, p. 382). Lewis, contudo, é tratado no livro como modelo/teoria.

No capítulo 10, “Ligações e Estrutura Molecular: Hibridização de Orbitais e Orbitais Moleculares”, os autores apresentam a LV inicialmente como teoria dentro do tópico “**Orbitais e Teorias de Ligação**”, conforme destacado a seguir: “a ideia de que as ligações são formadas pela sobreposição de orbitais atômicos é a base para a teoria da ligação de valência” (KOTZ, TREICHEL & WEAVER, 2009, p.382). Porém, como subtítulo apresenta como modelo em “**O Modelo de Ligação da Sobreposição de Orbitais**”. Dessa forma, a perspectiva da Ligação de Valência é tratada como modelo/teoria. Quanto à apresentação do modelo do orbital molecular, os autores ainda comentam sobre o paramagnetismo da molécula de O₂, considerando-a como teoria: “a teoria do OM pode ser usada para descrever a ligação no O₂ e em outras moléculas diatômicas descreveremos primeiro os quatro princípios usados para desenvolver a teoria” (KOTZ, TREICHEL & WEAVER, 2009, p.398).

LIVRO DIDÁTICO 4 (LD4)

No LD4, capítulo 9, verifica-se que os autores ao discutirem sobre a configuração eletrônica do Flúor, apresentam Lewis como modelo, conforme a seguir: “Segundo este modelo, ambos os átomos de F adquirem a configuração eletrônica 1s² 2s² 2p⁶” (MASTERTON, SLOWINSKI & STANITSKI, 2011, p. 191). Já no capítulo 10, intitulado “Estrutura Molecular”, aparece:

No momento, consideraremos duas teorias distintas: modelo do orbital atômico ou ligação de valência (Seção 10.3). Nesta teoria, os elétrons de valência estão distribuídos entre orbitais que são característicos dos átomos individuais. O modelo da ligação de valência pode ser aplicado às moléculas que “violam” a regra do octeto, bem como àquelas que a “obdecem”. modelo do orbital molecular (Seção 10.5). Neste modelo, os elétrons de valência estão distribuídos entre orbitais que são característicos da molécula como um todo. A teoria do orbital molecular tem sido aplicada, com admirável sucesso (MASTERTON, SLOWINSKI & STANITSKI, 2011, p.206).

Com base no texto, os modelos da LV e do OM aparecem como duas teorias inicialmente e, logo após como dois modelos, de maneira que são tratadas como modelo/teoria.

LIVRO DIDÁTICO 5 (LD5)

No LD5, Chang comenta sobre Lewis no início do capítulo 10, denominado Ligação Química II: Orbitais Moleculares e Geometria Molecular: “a teoria de Lewis, da

ligação química, embora seja útil e simples de aplicar, não nos diz como e porque se formam as ligações químicas” (CHANG, 1994, p. 410). Em relação às perspectivas LV e OM, o autor alega:

A Teoria do Enlace de Valência (TEV) postula que os electrões numa molécula ocupam orbitais atômicas dos átomos individuais. Permite-nos reter uma imagem individual dos átomos que participaram na formação das ligações. A segunda Teoria chama-se Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM) e pressupõe a formação dos orbitais moleculares (CHANG, 1994, p.427).

De acordo com os textos, Chang apresenta Lewis como teoria e os modelos da Ligação de Valência e do Orbital Molecular, ambos como teorias aproximadas.

LIVRO DIDÁTICO 6 (LD6)

O LD6 se diferencia dos livros anteriores, por apresentar Lewis exclusivamente como estruturas, conforme a seguir: “Em 1916, o químico norte-americano G. N. Lewis, desenvolveu um método de colocar os elétrons em átomos, íons e moléculas. Este método faz uso de diagramas, agora chamados de estruturas de Lewis” (RUSSELL, 1994, p.343). Em outro momento, ao comentar sobre os modelos da ligação de valência e o modelo do orbital molecular no capítulo 19 intitulado “Ligações Covalentes”, aponta:

Chamada *teoria de ligação de valência* (VB), é baseada na suposição de que (1) os níveis eletrônicos de energia em um átomo (orbitais atômicos; AOs) são usados quando o átomo forma uma ligação com um ou mais outros átomos, e que (2) um par de elétrons ligados ocupa um orbital em cada um dos átomos simultaneamente. O segundo método, a *teoria dos orbitais moleculares* (MO) (RUSSELL, 1994, p. 927).

Verifica-se, que Russell faz uso dos termos modelos e teorias de maneira indiscriminada. Nesse sentido, apresenta os modelos da Ligação de Valência e do Orbital Molecular, no início como teorias, porém, mais adiante, ao abordar sobre o Modelo do Orbital Molecular, apresenta como modelos, conforme o contexto a seguir:

N_2 , é, sem dúvida, muito estável e comum, e nós inalamos toda vez que respiramos. As medidas magnéticas indicam que todos os elétrons estão emparelhados no N_2 . (Não é paramagnético).
O modelo do MO da molécula N_2 está muito bem correlacionado com aquele apresentado pela VB (RUSSELL, 1994, p.959).

Em relação à explicação da molécula de N_2 , inferimos que Russell ao comentar sobre esta molécula, faz uma correlação entre dois modelos, ou seja, o “modelo do MO” (do inglês, significa “molecular orbital”), com modelo LV (cuja sigla VB, do inglês, significa “valence-bond”). O modelo de Lewis é tratado no livro como estrutura, já os modelos da LV e do OM como modelo/teoria.

LIVRO DIDÁTICO 7 (LD7)

Da mesma maneira como ocorreu no livro anterior, Brady e Humiston, apresentam Lewis no capítulo 4 como “estruturas”. A seguir, destacamos um trecho que reflete essa postura: “As estruturas de Lewis para as moléculas ligadas covalentemente e para os íons poliatômicos são muito úteis” (BRADY & HUMISTON,

1986, p. 129). Em outro momento, no capítulo 5 intitulado “Ligação Covalente e Estrutura Molecular”, os autores ao comentarem sobre LV e OM sinalizam:

Há duas abordagens importantes da ligação química baseadas nos resultados da mecânica quântica. Uma destas, chamada **teoria da ligação de valência**, nos permite reter uma visão de átomos individuais aproximando-se para formarem uma ligação covalente. A outra, chamada **teoria dos orbitais moleculares** (BRADY & HUMISTON, 1986, p.163).

De acordo com o texto, os autores apresentam os modelos da ligação de valência e do orbital molecular como teorias. Contudo, na análise que ora procedemos, tanto Russell (LD6) como Brady e Humiston (LD7), Lewis é tratado apenas como “estruturas”.

LIVRO DIDÁTICO 8 (LD8)

O LD8 ao tratar dos modelos de Lewis, da Ligação de Valência e do Orbital Molecular faz uma mistura daquilo que é apresentada nos demais livros analisados. Nesse sentido, os autores discutem sobre a natureza da ligação covalente: o compartilhamento do par de elétrons, as fórmulas de representação e a sobreposição de orbitais atômicos na LV.

No capítulo 14, ao tratar especificamente do tema “ligações covalentes em moléculas e íons poliatômicos”, os autores iniciam a discussão da ligação covalente abordando a molécula de hidrogênio, assim como os livros anteriores, porém consideram que:

Quando dois átomos de hidrogênio se unem para formar a molécula de H₂, cada átomo contribui com o seu elétron para formar um par de elétrons com spins opostos. Em geral, a molécula H₂ pode ser representada por uma fórmula com elétrons mostrados por pontos, H:H, ou por esta fórmula modificada como H↑↓H. O par de elétrons com spins opostos (: ou ↑↓) que é compartilhado pelo núcleo dos átomos de hidrogênio ligados na molécula H₂, constitui o par de elétrons covalente – geralmente chamado par ligante – que une os átomos juntamente (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, p. 279).

Ainda, dentro deste capítulo, os autores discutem que na formação da molécula de hidrogênio “o par ligante ocupa um orbital formado simplesmente pela superposição de orbitais atômicos dos átomos isolados” (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, p.280). No capítulo 15, assim como ocorreu o capítulo anterior, os autores dão enfoque à “teoria da ligação de valência” associando-a estereoquímica, deste modo consideram “a estereoquímica de uma molécula ou íon poliatômico pode ser relacionada com os orbitais atômicos envolvidos na formação das ligações covalentes” (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, p. 301).

CONSTRUINDO INFERÊNCIAS SOBRE OS LIVROS EM GERAL

Diante dos resultados obtidos, foi construído um quadro comparativo onde desejamos representar o que foi constatado nos livros didáticos de química escolhidos para a pesquisa. Propomos, assim, o quadro 2 a seguir:

Quadro 2: Comparativo quanto ao aspecto de considerar teorias ou modelos, as perspectivas de Lewis, da Ligação de Valência (LV) e do Orbital Molecular (OM) nos livros didáticos em geral.

LIVROS	LEWIS	LV	OM
--------	-------	----	----

LD1	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD2	Teoria	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD3	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD4	Modelo	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD5	Teoria	Teoria	Teoria
LD6	Estrutura	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD7	Estrutura	Teoria	Teoria
LD8	Teoria	Teoria	-

Fonte: Elaboração dos autores. (-) O LD8, não apresenta a TOM.

De acordo com os dados obtidos no quadro 2, verificou-se que há entraves graves presentes nos livros. Assim, iniciamos a análise geral dos livros tendo como ponto de partida duas questões que chamaram bastante a nossa atenção. A primeira revela que dos 08 livros didáticos de química escolhidos para realizar a pesquisa, 05 (ou seja, LD1/LD2/LD3/LD4/LD6) tratam LV e OM ora como modelos ora como teorias, ou seja, tais perspectivas são tratadas nos livros como modelo/teoria. Enquanto isso, apenas em LD5 e LD7, LV e OM aparecem como teorias, enquanto que no LD8, OM não é abordado, porém LV aparece também como teoria. Outra questão importante refere-se aos dados obtidos em relação ao LD1 e LD3. Nesse caso, todas as perspectivas teóricas são tratadas nos diferentes livros como modelo/teoria.

Sobre a perspectiva de Lewis, podemos constatar que é tratada de maneira distinta nos livros. Logo, Lewis é tratado ora como teoria (conforme ocorreu em LD2/LD5/LD8), ora como modelo (em LD4), ora como modelo/teoria (LD1/LD3) e ora ainda como estrutura (LD6/LD7), ou seja, Lewis é tratado de quatro diferentes formas nos diferentes livros didáticos de química. Em geral, o tratamento dos livros não é uniforme, uma vez que, as perspectivas teóricas de LEWIS, LV e OM, ora são tratadas como teoria, ora como modelo e ora como modelo/teoria. Entendemos, assim como Weisberg (2004) que as explicações de LEWIS, LV e OM, pelos livros didáticos correspondem ao fato de que: se precisamos de explicações químicas, precisamos construir modelos qualitativos.

Em síntese, as análises dos livros didáticos de química permitiram caracterizar o tratamento indiscriminado em relação às explicações sobre a ligação química ora denominando-as como modelo, ora como teoria e ora como modelo/teoria. Verificou-se que o cerne do problema reside no uso do termo “modelo” e “teoria” no âmbito educativo como se fossem “sinônimos”. Consideramos que a falta de clareza epistemológica sobre os termos modelos e teorias veiculadas pelos livros quanto o uso indiscriminado das perspectivas teóricas pode levar professores e estudantes a acreditarem que na ciência, esses conceitos sejam idênticos, o que é um equívoco, pois modelos são estruturas circunscritas nas teorias, que podem ser aplicados em seus princípios gerais (MORGAN; MORRISON, 1999). Para os químicos a distinção entre esses termos não é um problema genuíno, não significa muito em termos operacionais, em termos de realismo operativo como assevera Bensaude-Vincent (2009). Porém, na ciência em geral, fazer essa distinção torna-se importante tanto do ponto de vista epistemológico quanto do ponto de vista educacional.

CONCLUSÃO

Nesse trabalho, abordamos o problema acerca das três perspectivas teóricas que buscam explicar a natureza da ligação covalente. Assim, consideramos a noção de modelo como possibilidade para as perspectivas de LEWIS, LV e OM.

Quanto aos Modelos da Ligação de Valência e do Orbital Molecular, ambos possuem uma forte “dívida” teórica para a mecânica quântica e ao seu formalismo matemático, em particular, as duas perspectivas incorporam a equação de Schrödinger e, independente do tempo legal, em ambos os casos, o objetivo central é resolvê-las. Além disso, podemos notar que os modelos de Lewis, da Ligação de Valência e do Orbital Molecular, apresentam limitações, nenhum dos modelos é completamente autônomo do ponto de vista teórico; não são capazes de explicar completamente todos os aspectos da ligação covalente.

Portanto, pensar a química por meio de modelos é uma especificidade da linguagem química. Nosso argumento sugere que em ligação química não podemos saber como as moléculas são em si mesmas nem observar as forças que agem entre elas; o que acreditamos saber sobre elas é realmente o que é conhecido por meio de modelos, os quais são construídos devido aos nossos interesses e fins de investigação; uma perspectiva pragmática. Embora o entendimento de ligação química envolva três explicações que são normalmente chamadas de “teorias”, conforme constatado nos livros didáticos de química; sustentamos que sejam entendidas como modelos – três representações da mesma realidade relacionada com modelos distintos.

REFERÊNCIAS

- ADÚRIZ-BRAVO, A. A. (2001). Integración de la epistemología en la formación del profesorado de ciencias. Tese de Doutorado – Universitat Atonoma de Barcelona, Barcelona.
- _____. Concepto de modelo científico: Una mirada epistemológica de su evolución. En: Galagovsky, L. (coord.), Didáctica de las ciencias naturales: El caso de los modelos científicos, pp. 141-161. Buenos Aires: Lugar Editorial, 2011.
- _____. (2012). A ‘semantic’ view of scientific models for science education. *Science & education*, New York, 08, jan.
- _____. Algunas características clave de los modelos científicos relevantes para la educación química. *Educación Química*; Ciudad de México; 2012 v. 23, p. 248 – 256.
- ATKINS, P.W.; JONES, L. *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. 3.ed. Porto Alegre: Bookman, 2006. 965 p.
- BARDIN, L. *Análise de conteúdo*. Lisboa: Edições 70, 1977.
- BENSAUDE-VINCENT, B. Thechemists style of thinking. *Ber.wissenschaftsgesch*, [S.I], n.32, p.365 – 378, 2009.
- BRADY, J.; HUMISTON, G.E. *Química Geral*. Vol. I e II, Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 1986.
- BROWN, T. L.; LEMAY, H. E. Jr.; BURSTEN, B. E.; BURDGE, J. R. *Química – A ciência central*. 9.ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005. 972p.
- CHAGAS, A. P.; DAVANZO, C. U. *Gilbert Newton Lewis e a revolução dos pares*

eletrônicos. Química Nova, v. 16, n. 2, p. 152-154, 1993.

CHAMIZO, J. A. Los modelos de la química. Educación, México, v.17, p. 476-482.

CHANG, R. Química. 5.ed. Lisboa: Mc Graw Hill, 1994.

CRESWELL, J. W. (2007). Projeto de pesquisa: métodos qualitativo, quantitativo e misto (2a ed., L. de O. Rocha, Trad.). Porto Alegre: Artmed.

DÍEZ, J. A.; MOULINES, U. Fundamentos de filosofía de la ciencia. Barcelona, Ariel, 2ª edición, 1999.

GIERE, R. (1992). Cognitive Models of Science. Minneapolis: University of Minnesota Press.

_____. How models are used to represent reality. Philosophy of Science, Baltimore (USA), n. 71, p. 742-752, 2004.

_____. Model-based reasoning in scientific discovery, pp. 41-57. Nueva York: Kluwer Academic Publishers/Plenum Press, 1999.

GUGLIOTTI, M. Irving Langmuir: o milagre da ciência, Química Nova, v.24, n.4, 2001.

GUTIÉRREZ, R. Polisemia actual del concepto "modelo mental": Consecuencias Para La investigación didáctica, Investigações em Ensino de Ciências, 10(2), 209-226, 2005.

KOTZ, J. C.; TREICHEL, P. M.; WEAVER, G. C. Química Geral e Reações Químicas 6. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

LEWIS, G. N. (1916). The atom and the molecule. *Journal of the American Chemical Society* 38: 762-785.

LEWIS, G. N. (1923). Valence and the Structure of Atoms and Molecules. New York: Chemical Catalog Co. Reprinted, New York: Dover, 1966.

MASTERTON, W. L.; SLOWINSKI, E.J.; STANITSKI, C. L. Princípios de Química, 6ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2011, 698p.

MORGAN, M. S.; MORRISON, M. Model as Mediators: perspectives on natural and social science. Cambridge University Press, New York, 1999.

OH, P.S.; OH, S. J. What Teachers of Science Need to Know about Models: An overview. *International Journal of Science Education*, v. 33, n.8, p.1109 - 1130, 2011.

QUAGLIANO, J. V.; VALLARINO, L. M. Química. 3ª ed. Rio de Janeiro, Guanabara Dois. 1979.

RUSSELL, J. B. Química Geral. 2ª ed. São Paulo: Makron Books, 1994. 1v. 2v.

WEISBERG, M. Qualitative theory and chemical explanation. *Philosophy of science*. v.71, n.5, p. 1071-1081, 2004.