

Modelos em Química: o ensino de ligação química

Models in Chemistry: the teaching of chemical bonding

Resumo

O ensino dos modelos de ligação no nível superior de Química geralmente é feito sem a devida distinção entre as diferentes representações, sem explicar os limites e potencialidades destes, bem como sem a devida compreensão do que seja um modelo e acerca da incomensurabilidade destes. De modo que, mesmo que haja um modelo científico mais desenvolvido acerca de uma dada teoria, outros poderão ser utilizados uma vez que a fenomenologia a ser explicada não requeira tal grau de complexidade. Esta dificuldade de mediação recai em uma carência compreensiva dos estudantes que acabam não se apropriando da relevância dos modelos científicos na Química. Deste modo, a finalidade deste ensaio crítico é apresentar uma sistematização acerca do ensino das ligações químicas focando nos três principais modelos de ligação utilizados: o modelo eletrostático simples, a Teoria da Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Palavras chave: Modelos Científicos, Ligações Químicas, Ensino de Química

Abstract

The teaching of the Connecting Models in the higher level of Chemistry is usually done without the distinction between the different models, without explaining the limits and potentialities of these, as well as without the proper understanding of what a model is and about their incommensurability. So, even if there is a more developed scientific model about a given theory, others may be used since the phenomenology to be explained does not require such a degree of complexity. This difficulty of mediation lies in a comprehensive lack of students who end up not appropriating the relevance of scientific models in chemistry. Thus, the purpose of this critical test is to present a systematization about the teaching of chemical bonds focusing on the three main connection models used: the simple electrostatic model, the Valencia Link Theory (TLV) and Molecular Orbital Theory (TOM).

Key words: Scientific Models, Chemical Bonding, Chemistry Teaching

Introdução

Diariamente utilizamos diversos objetos que são formados por diferentes materiais, que se caracterizam por terem propriedades diferentes. Estas propriedades específicas de cada material fundamentam-se nas estruturas internas destes, em outros termos, na forma como seus constituintes encontram-se ligados. Podemos dizer, então, que o conhecimento do

conteúdo de ligações químicas é essencial para um melhor entendimento do nosso mundo e das transformações da matéria que ocorrem ao nosso redor (TOMA, 1997).

Apesar do conceito “ligação química” ser importante para a compreensão de diversas propriedades dos materiais, seu ensino tem ficado restrito a memorizar uma série de regras e convenções que não favorecem a apropriação do conhecimento químico do estudante. A regra do octeto, por exemplo, rege as explicações das ligações químicas e os estudantes concebem, em forma de dogma, que átomos se ligam porque “querem” ficar com 8 elétrons na última camada. Princípios gerais como, por exemplo, energia e entropia, ficam subsumidos, dando lugar a regras que passam a mover a explicação das ligações químicas. (MORTIMER, MOL e PAES 1994).

A literatura aponta que essa abordagem de ensino de ligação química não tem dado bons resultados no que se refere à aprendizagem e os estudantes têm desenvolvido diversas concepções alternativas que não correspondem às concepções aceitas atualmente pela comunidade científica (FERNANDEZ; MARCONDES, 2006).

Frequentemente na ciência Química, busca-se criar explicações que possam de justificar fenômenos que ocorrem no plano fenomenológico. Na tentativa de fundamentá-los a nível teórico, os cientistas se empenham propor representações explicativas para estes. A estas representações da realidade damos o nome de modelos.

De modo a tornar o ensino de ligações químicas mais significativo, é necessário trabalhar, nos diferentes níveis de escolaridade, os modelos explicativos para cada tipo ligação química, mostrando suas principais características, potencialidades e limitações, suas diferentes interfaces teóricas, bem como análises comparativas destes modelos. É preciso mostrar aos estudantes que a explicação do meio material é feita utilizando modelos e que os modelos de ligação química ser compatíveis com o modelo atômico estudado (CHASSOT, 1996). É necessário que os professores atentem que a ideia de modelo não pode ficar restrita ao conteúdo de modelo atômico. É preciso que questões de modelagem apareçam em diversos momentos em sala de aula e, no ensino de ligação química, essa discussão não pode ficar subsumida.

A finalidade deste ensaio crítico é apresentar uma sistematização acerca do ensino das ligações químicas focando nos três principais modelos de ligação utilizados: o modelo eletrostático simples, a Teoria da Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Modelos Científicos

O significado mais comum da palavra ‘modelo’ relaciona-se com manequins ou miniaturas, isto é, uma representação concreta de alguma coisa. Talvez por isto muitas pessoas pensem em modelos como cópias da realidade. Todavia, em Ciência devemos considerar modelos apenas como representações de objetos, mas também de eventos, processos ou ideias (GILBERT; BOULTER, 1995). Um modelo científico é uma descrição simplificada de um sistema físico idealizado, que é aceito pela comunidade científica, e serve como ponte entre o mundo real, e um mundo idealizado e simplificado, existente apenas na mente dos cientistas, que preserva as características essenciais do sistema ou fenômeno que se pretende descrever, explicar ou prever (Greca e Moreira, 2002 apud VEIT e ARAUJO, 2005, p 3 Devemos considerar ainda que eles não existem apenas para descrever tais entidades, mas que também provêm a base para o desenvolvimento de explicações. Outro aspecto relevante é que modelos são criados a partir de ideias na mente de uma pessoa. Sendo assim, independente da forma de expressão de um determinado modelo, podemos considerar que ele existe, inicialmente, como um modelo mental.

A elaboração de um modelo mental é uma atividade conduzida por indivíduos, sozinhos ou em grupo. O resultado de tal atividade pode ser expresso através de ações, fala, escrita ou outra forma simbólica. Então, aquilo que conhecemos de um modelo mental é o que chamamos de modelo expresso (GILBERT; BOULTER,1995). Um modelo mental pode ser expresso através de desenhos, analogias, diagramas, gráficos, esquemas ou outra forma de linguagem que seja mais conveniente. Às vezes, o modelo expresso diverge do modelo mental que o originou devido à dificuldade em expressar um raciocínio, ou mesmo à escolha de uma linguagem inadequada. Os modelos expressos que são aceitos socialmente após testes pelos cientistas são chamados modelos consensuais (GILBERT; BOULTER,1995). Na tentativa de facilitar o aprendizado de ciências são desenvolvidos modelos de ensino (GILBERT; BOULTER,1995). O desenvolvimento desses modelos tem o propósito de ajudar os alunos a entenderem modelos consensuais. A elaboração de um modelo de ensino é um processo complexo, pois ele deve preservar a estrutura do modelo consensual e lidar com o conhecimento prévio dos alunos a fim de que eles construam sua própria compreensão. Sendo assim, um modelo de ensino representa uma maneira diferente de apresentar um modelo consensual e não simplesmente uma simplificação do mesmo (JUSTI, 1997). Tais modelos são normalmente apresentados em forma de objetos concretos, desenhos, analogias e simulações diversas, trata-se de uma estratégia para didatizar o conhecimento científico.

Em função do caráter dinâmico da ciência e da provisoriedade dos conhecimentos produzidos ao longo do tempo, os modelos podem se modificar, ou seja, um novo modelo pode ser criado para explicar mais fatos que o modelo anterior e fazer novas previsões. Mas isso não invalida, necessariamente, a utilização do antigo modelo para as explicações feitas anteriormente, entretanto ele se torna limitado. Os modelos continuam vigentes quando apresentam utilidade, apesar de suas limitações sendo, desta forma, reflexo de seu cenário sócio histórico, diversos modelos/representações foram “abandonados” ou não devido a equívocos que foram revelados através de explicações posteriores. Seu uso está intrinsecamente ligado ao conhecimento químico, visto ser preciso mais que descrever propriedades macroscópicas, portanto, observáveis diretamente. Dessa maneira a abordagem de tópicos como teoria atômica, teoria cinética, ligações e reações químicas, recai no uso de modelos para sua explicação (FERNANDEZ; MARCONDES, 2006).

Desse modo, acreditamos que ao trabalhar com conteúdos como ligações químicas, deve-se levar em consideração que a discussão/ensino é uma representação teórica, uma explicação aceita pela comunidade científica, sobre a formação de substâncias das quais temos acesso às propriedades macroscópicas que servem para identificá-las. Esta discussão deve ser levada para a sala de aula com o intuito de que os estudantes não cometam os corriqueiros erros de compreenderem o modelo como a realidade.

Como dito anteriormente, os materiais podem possuir diversas propriedades, existem aquelas que são características de um dado grupo de materiais. Quanto a propriedade de condução de eletricidade, por exemplo, existe um grupo de materiais que conduz significativamente eletricidade no estado sólido; percebe-se também a ocorrência de um outro grupo que não conduz eletricidade no estado sólido, mas conduz quando fundidos ou em solução aquosa; por fim, nota-se um grupo de substâncias que não conduz eletricidade em quaisquer condições. Cientistas propuseram que estas propriedades são decorrentes dos tipos de ligações químicas presentes nestes materiais, estabeleceram que nestes ocorram, respectivamente, ligações metálicas, ligações iônicas e ligações covalentes.

Modelos e Tipologia das Ligações Químicas

Ligações Químicas são interações eletrostáticas entre uma carga pontual positiva e

uma carga pontual negativa formando uma espécie, a qual sua cuja natureza é estabelecida a partir dos átomos ou íons que se ligam. Quando se ligam, as espécies formadas adquirem um estado de mais baixa energia, tornam-se mais estáveis. O Modelo Eletrostático Simples que afirma que nas ligações químicas os prótons existentes em um dado átomo atraem os elétrons existentes na eletrosfera de outro átomo, estabelecendo assim a interação entre estes.

Nesta interação, ocorrem forças atrativas e repulsivas, que segundo a lei de Coulomb são diretamente proporcionais ao módulo das cargas das partículas e inversamente proporcionais ao quadrado da distância entre elas.

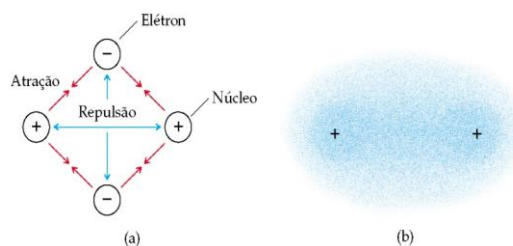


Figura 1. Esquema ilustrativo de interações de natureza eletrostática entre partículas.

Fonte: BROWN; LeMAY; BURSTEN, 2005.

De acordo com este modelo podemos afirmar que quando os elétrons são atraídos pelos núcleos dos átomos envolvidos numa ligação química, estes elétrons podem ser: i) atraídos com uma força que mantenha estes no eixo inter-nuclear sendo compartilhados por dois átomos; ii) atraídos fracamente de modo a ficarem deslocalizados por todos os átomos presentes neste material, como uma espécie de “mar de elétrons”; iii) fortemente atraídos por um dos átomos da ligação, de modo que um átomo perde um elétron e o outro ganha este elétron, formando íons que se atraem: o átomo que perde o elétron, torna-se o íon positivo (cátion) e o átomo que ganha o elétron, torna-se o íon negativo (ânion).

Com base neste modelo é possível explicar propriedades como, por exemplo, condução de eletricidade nos metais, uma vez que neste modelo os elétrons deslocalizados se movem continuamente na estrutura, como uma espécie de mar de elétrons promovendo assim a condução.

Ainda com base no modelo eletrostático simples, pode-se também explicar os elevados pontos de fusão dos sólidos iônicos uma vez que neste, espécies com cargas pontuais opostas interagem eletrostaticamente, de modo que na fusão devem ser enfraquecidas estas interações a fim de que as espécies se afastem passando para a fase líquida; como são interações de intensidade elevada, faz-se necessário um alto fornecimento de energia.

Ligação Iônica

Apesar de explicar uma série de propriedades, o uso do Modelo Eletrostático Simples, pode nos direcionar para alguns problemas no ato educativo. Com relação às ligações iônicas, a ideia de forte atração entre átomos e posterior formação de íons pode gerar nos alunos a noção de que ocorre apenas uma única ligação nos compostos iônicos: entre o par de átomos envolvido na transferência de elétrons. Esta concepção remete à ideia de formação de unidades discretas nos compostos iônicos; fato que não ocorre, uma vez que nos sólidos iônicos os compostos formados por cátions e ânions encontram-se arrançados em uma rede tridimensional.

Para explicar a formação dos sólidos iônicos foi desenvolvido um modelo explicativo de base energética denominado ciclo de Born-Haber. De acordo com o ciclo de Born-Haber, o sólido iônico é formado a partir de suas espécies no estado fundamental, passando por diferentes etapas de transformação até chegar à constituição do sólido.

Geralmente, professores e livros didáticos associam a ligação iônica à regra do octeto, que estabelece que átomos em geral se estabilizam com 8 elétrons em sua última camada. Nessa visão, a configuração eletrônica dos átomos e os oito elétrons no último nível são fatores determinantes na formação da ligação iônica. Tal concepção favorece a formação de dogmas que dificultam a compreensão da formação dos compostos iônicos, uma vez que substitui, por exemplo, princípios mais gerais como as variações de energia envolvida na formação das ligações entre os átomos.

Em relação aos problemas que os alunos apresentam sobre ligação química iônica, segundo Taber (1994), são encontradas na literatura as principais concepções alternativas dos educandos: *A ligação química iônica se dá através da transferência de elétrons* – evento através do qual os íons são formados; *A configuração eletrônica determina o número de ligações iônicas formadas* (por exemplo, no caso do composto iônico cloreto de sódio, um átomo de sódio pode doar apenas um elétron, podendo formar apenas uma ligação iônica com o íon cloreto). Dessa forma existe apenas uma única ligação, sendo assim, as outras interações são apenas forças; *Utilização indiscriminada de termos antropomórficos e aplicações animistas da regra do octeto*, como por exemplo, átomos têm tendência a perderem elétrons ou ganharem elétrons para completarem os seus octetos; *Pares de íons são tidos como moléculas de uma substância iônica*; *Como os alunos não têm claro o modelo para a estrutura de um composto iônico, passam a ter dificuldades em explicar as propriedades desses compostos*.

A utilização de modelos representativos do retículo cristalino pode auxiliar os estudantes na compreensão das ligações iônicas de modo que seja possível perceber que não há uma unidade discreta composta por cátions e ânions, o que há é um retículo cristalino em que os íons presentes nos pontos de rede dos sólidos interagem por meio de interações eletrostáticas. Além disso, através da utilização destes modelos os estudantes podem compreender que o que é expresso na fórmula molecular de um composto iônico é a proporção mínima dos íons constituintes da substância.

Ligação Metálica

As ligações metálicas são interações que mantêm unidos os átomos de um metal. Os compostos metálicos são agrupados por possuírem uma série de características em comum: são sólidos à temperatura ambiente (exceto o mercúrio), são bons condutores de calor e eletricidade, possuem de baixos a altos pontos de fusão, além de serem dúcteis e maleáveis. Para explicar estas propriedades foi desenvolvido um modelo de ligação denominado “mar de elétrons”.

No modelo do mar de elétrons, os elétrons de valência estão confinados ao metal por meio de atrações eletrostáticas aos núcleos de seus átomos; eles estão uniformemente distribuídos por toda a estrutura. Por meio deste modelo é possível prever tais propriedades para os metais, como por exemplo, o seu estado físico uma vez que os seus constituintes interagem por meio de atrações “núcleos dos átomos-mar de elétrons”. O mar de elétrons é uma analogia que visa explicitar o elevado grau de liberdade dos elétrons. Espera-se, com a utilização dessa analogia, que os alunos sejam capazes de compreender significativamente a deslocalização dos elétrons e a sua interação com vários núcleos atômicos.

Na prática da sala de aula, porém, na maioria das vezes, isso não acontece – como comprovado pelas investigações no ensino de ligação metálica através da analogia do “mar de elétrons”. Uma dessas investigações aponta que, com frequência, os alunos utilizam explicações referentes a ligações covalentes ou iônicas quando são solicitados a dar explicações sobre aspectos da ligação metálica (TABER, 1994). Outras conclusões relevantes dessa pesquisa são que os alunos parecem aceitar a metáfora de ‘mar’ sem críticas, tendem a desenvolver a ideia de cátions e/ou elétrons flutuando, nadando, etc. em um mar, apresentam ideias de vasto excesso de elétrons (o qual não é possível na estrutura de um metal neutro), ou ainda, de que a função dos elétrons na estrutura metálica é servir de “cola”.

Ligação Covalente

Para os compostos covalentes foi desenvolvida uma teoria, que faz parte do modelo eletrostático simples, denominada teoria de Lewis. Conforme esta teoria, átomos se ligam através de seus elétrons de valência formando uma espécie química mais estável que as anteriores, devido a diminuição de energia potencial do sistema formado.

Na estrutura de Lewis, os elétrons de valência livres são representados por pontos e os elétrons compartilhados que formam a ligação são representados por linhas. Pode-se evidenciar esta representação em sala de aula através do uso do modelo de pau e bolas, no qual os próprios estudantes podem montar a representação das moléculas.

Associada à concepção de Lewis, encontra-se a regra do octeto; muito utilizada no ensino de ligações químicas, fundamentalmente no ensino médio. Geralmente esta regra é discutida através de uma abordagem animista dos átomos. A todo o momento, tanto livros didáticos, como os professores e os alunos consideram o preenchimento da última camada com oito elétrons como algo que tornarão os átomos mais felizes e estáveis, desviando completamente o foco do conhecimento, impedindo assim que os alunos compreendam os processos envolvidos na formação das ligações.

Apesar de certos problemas de abordagem, o modelo de Lewis é bastante útil na descrição qualitativa das ligações químicas. Porém, quando se quer discutir questões energéticas, geométricas ou aspectos de natureza espectroscópica, torna-se necessário lançar mão de teorias quânticas que enfocam a ligação química em termos da combinação de orbitais, a saber: a Teoria da Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM).

A Teoria da Ligação de Valência (TLV) propõe uma adaptação das ideias de Lewis, sobre a localização dos elétrons ligantes, com a concepção de orbital atômico desenvolvida pela teoria quântica. O orbital é tratado como a região de máxima probabilidade de se encontrar o elétron, estabelecido graficamente por meio da resolução do quadrado da função de onda proposta por Schrodinger.

O termo orbital é muito presente no conceito de ligações. Ao se discutir o conceito de orbital faz-se necessária uma nítida distinção entre este e o conceito de orbital que surge no estudo dos modelos atômicos, pois, uma vez que estas palavras são parecidas, devido à semelhança entre os termos órbita e orbital, estas palavras são comumente, elas são comumente confundidas por estudantes em diferentes níveis de escolaridade (LOPES, 2007).

Na teoria da ligação de valência, o acúmulo de densidade eletrônica entre dois núcleos pode ser considerado como o que ocorre quando dois orbitais atômicos de valência se superpõem. A superposição de orbitais permite que os dois elétrons de spins contrários compartilhem um espaço em comum entre os núcleos, formando uma ligação covalente.

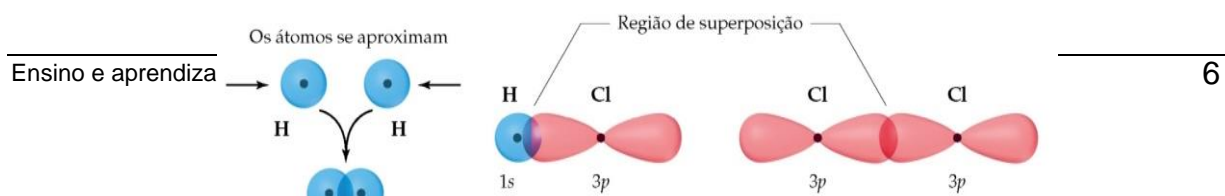


Figura 2. Representação de superposição de orbitais na formação de uma ligação covalente.

Fonte: BROWN; LeMAY; BURSTEN, 2005.

A TLV é uma teoria que como as demais busca tecer explicações acerca de uma dada fenômeno. Para ampliar a sua capacidade explicativa, expandiu o seu modelo (por meio dos processos de hibridização), a fim de explicar as ligações em espécies poliatômicas e as suas geometrias. Entretanto, mesmo com a ideia de orbitais híbridos a TLV apresentou alguns limites, não conseguindo explicar, por exemplo, a forte atração da substância oxigênio por um campo magnético (Paramagnetismo), decorrente da presença de elétrons desemparelhados na molécula. Para explicar o paramagnetismo do $O_2(l)$ e uma série de outros fenômenos, utilizamos uma teoria de ligação capaz de representar os elétrons desemparelhados da molécula de oxigênio, que é denominada Teoria do Orbital Molecular (TOM). Na TOM, a combinação linear de orbitais atômicos dão origem a orbitais moleculares que são descritos através dos seus níveis de energia na forma de um diagrama de orbitais.

A ideia de diagramas moleculares por vezes se torna um obstáculo à aprendizagem do estudante, que dificilmente consegue estabelecer semelhanças entre o diagrama e uma molécula; isto por que eles estão acostumados com as representações estruturais moleculares.

A superposição dos orbitais dos átomos envolvidos na ligação, leva à formação de dois tipos de orbitais moleculares: orbital molecular ligante e um orbital molecular antiligante. Um orbital molecular ligante tem menor energia e maior estabilidade do que os orbitais atômicos dos quais se formou. Ao contrário, um orbital molecular antiligante tem maior energia e menor estabilidade que os orbitais atômicos dos quais se formou. A formação de um orbital molecular ligante favorece a formação da molécula, ao passo que um orbital molecular antiligante desfavorece-a.

Apesar da teoria do orbital molecular não tratar da formação da ligação covalente, mas sim da formação das moléculas, ela é largamente utilizada para explicar a formação de compostos com ligação covalente.

Considerações Finais

Os modelos de ligação não são modelos excludentes, eles foram criados com a finalidade de dar conta de uma série de fenômenos que por vezes outras teorias não abarcavam. Os diferentes modelos podem ser utilizados a depender da necessidade explicativa. Estes modelos consensuais ao serem mediados para modelos de ensino devem ser discutidos de modo a simplificarem o saber sábio sem descaracterizá-lo.

Esse texto tentou evidenciar a importância dos modelos para o ensino e a aprendizagem do conceito de ligações químicas, tema importante para o entendimento dos materiais. Seja em uma abordagem clássica ou quântica, o trabalho com modelos é de

fundamental importância para que o estudante entenda as limitações e potencialidades de um modelo.

Uma maneira de abordar os modelos de ligação química no ensino é trabalhar as propriedades dos materiais, a exemplo da solubilidade, temperatura de fusão, condutividade elétrica, que poderão fornecer informações acerca da natureza das ligações presentes nas substâncias. Ao se trabalhar as propriedades dos materiais, através de experimentos, as evidências observadas ou os resultados obtidos, portanto a nível fenomenológico, poderão ser explicados recorrendo-se aos modelos teóricos de ligações químicas, procurando facilitar a compreensão desse tema no nível teórico conceitual.

Acreditamos que atividades de modelagem e a discussão de modelos históricos possam ajudar o aluno a entender as dimensões da construção do conhecimento científico, bem como facilitar a aprendizagem do conteúdo. Discutir modelos em ligação química torna-se importante para que as discussões sobre modelos, não fiquem restritas apenas ao conteúdo de modelos atômicos.

Referências

- BROWN; LeMAY; BURSTEN. **Química: a ciência central**. Tradução: Robson Mendes Matos. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 9ª ed., 2005.
- CHASSOT, A. Sobre prováveis modelos de átomos, *Química Nova na Escola*, n. 3, p. 1, 1996.
- FERNANDEZ, C., & MARCONDES, M. E. R. **Concepções dos estudantes sobre ligação química**. *Química Nova na Escola*, 2006.
- FERREIRA, P e JUSTI, R. Modelagem e o fazer Ciências. **Química Nova na escola**. Nº 28, 2008.
- GILBERT, J.K. e BOULTER, C.J. Stretching models too far. **Annual Meeting of the American Educational Research Association**. Anais. San Francisco, 1995.
- JUSTI, R.S. **Models in the Teaching of Chemical Kinetics**. Unpublished PhD Thesis. Reading: The University of Reading, 1997.
- LOPES, Alice Casimiro. **Currículo e Epistemologia**. Ijuí: Editora Unijuí, 2007, p. 205–228.
- MORTIMER, E. F., Mol, G. & Paes, L. D. Regra do octeto e teoria da ligação química no ensino médio: dogma ou ciência? **Química Nova na Escola**, 17, 243-252, 1994.
- TABER, K. S. Misunderstanding the ionic bond, **Education in Chemistry**, 31, 100-103, 1994.
- TOMA, Henrique. Ligação química: abordagem quântica ou clássica?. **Química Nova na Escola**, 06, 08-12, 1997.