



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA
FACULDADE DE EDUCAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENSINO, FILOSOFIA E HISTÓRIA DAS CIÊNCIAS**

LUCAS DOS SANTOS FERNANDES

**CONCEITUAÇÃO DA LIGAÇÃO COVALENTE POR
LICENCIANDOS EM QUÍMICA**

Salvador

2019

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Universitário de Bibliotecas (SIBI/UFBA),
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Fernandes, Lucas dos Santos
Conceituação da Ligação Covalente por Licenciandos
em Química / Lucas dos Santos Fernandes. -- Salvador,
2019.
124 f.

Orientador: José Luís de Paula Barros Silva.
Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Ensino, Filosofia e História das Ciências) --
Universidade Federal da Bahia, Universidade Federal
da Bahia, Faculdade de Educação, 2019.

1. Conceito. 2. Ligação Covalente. 3. Ensino de
Química. I. Silva, José Luís de Paula Barros. II.
Título.

LUCAS DOS SANTOS FERNANDES

**CONCEITUAÇÃO DA LIGAÇÃO COVALENTE POR
LICENCIANDOS EM QUÍMICA**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, Faculdade de Educação, Universidade Federal da Bahia e da Universidade Estadual de Feira de Santana, como requisito para a obtenção do grau de Doutor.

Orientador: Prof. Dr. José Luís de Paula Barros Silva

Salvador

2019

LUCAS DOS SANTOS FERNANDES

**CONCEITUAÇÃO DA LIGAÇÃO COVALENTE POR LICENCIANDOS EM
QUÍMICA**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, da Universidade Federal da Bahia e da Universidade Estadual de Feira de Santana, como requisito para a obtenção do grau de Doutor.

Salvador, 02 de Dezembro de 2019.

Banca Examinadora

José Luís de Paula Barros Silva – Orientador _____
Doutor em Química pela Universidade Federal da Bahia – UFBA
Universidade Federal da Bahia – UFBA

Angela Fernandes Campos _____
Doutora em Química Inorgânica pela Universidade Federal de Pernambuco – UFPE
Universidade Federal Rural de Pernambuco – UFRPE

Abraão Felix da Penha _____
Doutor em Ensino, Filosofia e História das Ciências pela Universidade Federal da Bahia – UFBA
Universidade do Estado da Bahia – UNEB

Hélio da Silva Messeder Neto _____
Doutor em Ensino, Filosofia e História das Ciências pela Universidade Federal da Bahia – UFBA
Universidade Federal da Bahia – UFBA

Isadora Melo Gonzalez _____
Doutora em Ensino, Filosofia e História das Ciências pela Universidade Federal da Bahia – UFBA
Universidade Federal da Bahia – UFBA

A

Severino José dos Santos Filho, meu avô e pai,
(*in memoriam*), por todo amor que me deu.

AGRADECIMENTOS

À minha família, por todo amor, apoio e compreensão incondicionais.

Aos meus amigos, por toda alegria, paciência e carinho que me proporcionam.

Aos colegas acadêmicos que me enviaram livros de todo o Brasil e do exterior.

À professora, ex-orientadora e amiga Profa. Dra. Angela Fernandes Campos por ter acreditado em mim desde o início da trajetória acadêmica na UFRPE.

A meu orientador, Prof. Dr. José Luís de Paula Barros Silva, pela confiança, paciência e ensinamentos.

À UNIVASF e colegas do Colegiado de Ciências da Natureza - SRN por todo apoio durante esta jornada.

Aos sujeitos de pesquisa que participaram deste estudo.

À banca examinadora pelas valiosas contribuições para a melhoria desta tese.

A estes, meus sinceros agradecimentos.

*A beleza de uma coisa viva
não são os átomos de que ela é feita,
mas o modo como esses átomos estão unidos.*

Carl Sagan

FERNANDES, Lucas dos Santos. Conceituação da ligação covalente por licenciandos em Química. 2019. Orientador: Prof. Dr. José Luís de Paula Barros Silva. 105 f. il. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências) – Faculdade de Educação, Universidade Federal da Bahia, Universidade Estadual de Feira de Santana, Salvador, 2019.

RESUMO

Esta pesquisa investigou o conceito de ligação covalente. Pesquisas nacionais e internacionais revelam que esse conceito é pouco estudado em detalhes e que existem muitas concepções alternativas associadas a ele. Soma-se a isso a importância da compreensão desse conceito para a aprendizagem de outros conteúdos químicos, tais como entalpias de ligação, mecanismos de reação e estrutura submicroscópica da matéria. O objetivo principal deste estudo foi compreender como licenciandos em Química conceituam ligação covalente e empregam este conceito na resolução de problemas químicos. Para explicar a conceituação da ligação covalente foi utilizada a teoria de Vigotski da formação e do desenvolvimento de conceitos cotidianos e científicos. Cada conceito corresponde ao significado das palavras e pode ser definido por meio de suas características, as quais formam um sistema conceitual. As características da ligação covalente são: compartilhamento de elétrons, estabilidade, elevada densidade eletrônica internuclear, energia de ligação, comprimento, direção, multiplicidade, polaridade, sobreposição de orbitais, emparelhamento de spins e ressonância. A metodologia desta pesquisa é qualitativa e corresponde a um estudo do tipo explicativo. Participaram deste estudo treze estudantes do último semestre do curso de Licenciatura em Química. Os dados foram coletados por meio de questionário e entrevistas. A análise dos dados foi realizada buscando-se os termos ou expressões relativas ao conceito de ligação covalente e suas características. Comparando as características da ligação covalente que compõem o mapa conceitual elaborado nesta pesquisa com as respostas dos estudantes, percebeu-se que o sistema conceitual deles é limitado a poucos conceitos: compartilhamento de elétrons, sobreposição de orbitais e estabilidade, com eventuais citações acerca de outras características, incluindo-se concepções alternativas e equivocadas. Tal sistema revelou-se híbrido, pois apresenta características dos modelos clássico e quântico da ligação covalente. Isso sugere que o conceito de ligação covalente foi aprendido de forma parcial pelos estudantes investigados. Os resultados apontam para a necessidade de melhorar o ensino da ligação covalente na formação inicial dos professores de Química. Um ponto que nos parece crucial é a articulação das disciplinas que trabalham com esse conceito. Apesar da limitação, o sistema conceitual híbrido apresentado pelos estudantes mostra-se coerente com o que se pratica no nível de ensino em que eles lecionam. Contudo, recomenda-se que o ensino de ligação covalente privilegie o modelo quântico, pois oferece mais ferramentas para a compreensão da estrutura submicroscópica da matéria. Além disso, é preciso que o ensino de ligação covalente faça a distinção entre os modelos clássico e quântico e seja adequado ao nível de ensino, ao modelo atômico previamente abordado e ao nível de desenvolvimento cognitivo dos estudantes.

Palavras-chave: Ligação covalente. Conceito científico. Sistema conceitual.

FERNANDES, Lucas dos Santos. Conceptualization of covalent bonding by chemistry undergraduates. 2019. Thesis advisor: Teacher. Doctor. José Luís de Paula Barros Silva. 105 f. Thesis (Doctorate degree in Teaching, Philosophy and History of Sciences) – Faculdade de Educação, Universidade Federal da Bahia, Universidade Estadual de Feira de Santana, Salvador, 2019.

ABSTRACT

This research investigated the concept of covalent bonding. National and international research reveals that this concept is poorly studied in detail and that there are many alternative conceptions associated with it. Added to this is the importance of understanding this concept for the learning of other chemical contents, such as enthalpies of binding, reaction mechanisms and submicroscopic structure of matter. The main objective of this study was to understand how undergraduates in chemistry conceptualize covalent bonding and employ this concept in solving chemical problems. To explain the conceptualization of covalent bonding, Vygotsky's theory of the formation and development of everyday and scientific concepts was used. Each concept corresponds to the meaning of words and can be defined by their characteristics, which form a conceptual system. The characteristics of covalent bonding are: electron sharing, stability, high internuclear electron density, binding energy, length, direction, multiplicity, polarity, orbital overlap, spins pairing and resonance. The methodology of this research is qualitative and corresponds to an explanatory study. Thirteen students from the last semester of the Chemistry Degree course participated in this study. Data were collected through questionnaire and interviews. Data analysis was performed searching the terms or expressions related to the concept of covalent bonding and its characteristics. Comparing the characteristics of the covalent bond that make up the concept map elaborated in this research with the students' answers, it was noticed that their conceptual system is limited to a few concepts: electron sharing, orbital overlap and stability, with possible citations about other characteristics, including alternative and misconceptions. Such system proved to be hybrid because it presents characteristics of the classic and quantum covalent bonding models. This suggests that the concept of covalent bonding was partially learned by the students investigated. The results point to the need to improve the teaching of covalent bonding in the initial formation of chemistry teachers. A point that seems crucial to us is the articulation of the disciplines that work with this concept. Despite the limitation, the hybrid conceptual system presented by the students is consistent with what is practiced at the level of education in which they teach. However, it is recommended that covalent bonding teaching favor the quantum model as it offers more tools for understanding the submicroscopic structure of matter. In addition, covalent bonding must distinguish between classical and quantum models and be appropriate to the level of education, the atomic model previously addressed, and the level of cognitive development of students.

Keywords: Covalent bond. Scientific concept. Conceptual system.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Formação da molécula de Iodo (I_2) segundo Lewis	29
Figura 2 –	Estruturas de Lewis do íon nitrato (NO_3^-)	35
Figura 3 –	Gráfico energia de interação x distância internuclear da molécula de Hidrogênio	43
Figura 4 –	Mapa conceitual do conceito de ligação covalente	49
Figura 5 –	Características da ligação covalente em artigos científicos	61
Figura 6 –	Características da ligação covalente em teses e dissertações	67
Figura 7 –	Exemplo de ligação covalente fornecido por E8	78
Figura 8 –	Exemplo de ligação covalente fornecido por E12	79
Figura 9 –	Escala de força para as ligações covalentes múltiplas segundo E10	81
Figura 10 –	Exemplo fornecido por E10 para a direção da ligação covalente	89
Figura 11 –	Exemplo de ligação covalente múltipla fornecido por E2	90

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 –	Perguntas do questionário sobre ligação química e ligação covalente	53
Quadro 2 –	Problemas propostos após a entrevista	55
Quadro 3 –	Objetivos dos problemas propostos	56
Quadro 4 –	Categorização das características da ligação covalente segundo os modelos explicativos	68
Quadro 5 –	Características da ligação covalente citadas pelos estudantes nas questões 1-5	70
Quadro 6 –	Categorização das características da ligação covalente segundo os modelos explicativos	80
Quadro 7 –	Características da ligação covalente citadas pelos estudantes nas entrevistas	93
Quadro 8 –	Características da ligação covalente citadas voluntariamente pelos estudantes na primeira questão da entrevista	101
Quadro 9 –	Roteiro básico das entrevistas e objetivo das perguntas	123

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	14
2.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
2.1	A FORMAÇÃO DE CONCEITOS NA PERSPECTIVA HISTÓRICO-CULTURAL	17
2.1.1	Conceitos Cotidianos e Científicos	18
2.2	LIGAÇÃO QUÍMICA: CONCEITO E TIPOS	22
2.2.1	Tipos de Ligação Química	23
2.2.1.1	<i>Ligação Covalente</i>	23
2.2.1.2	<i>Ligação Iônica</i>	24
2.2.1.3	<i>Ligação Metálica</i>	24
2.2.1.4	<i>Distinção Básica Entre os Tipos de Ligação Química</i>	25
2.2.2	Características da Ligação Covalente	26
2.2.2.1	<i>Modelo Clássico da Ligação Covalente</i>	26
2.2.2.1.1	Compartilhamento de Elétrons	27
2.2.2.1.2	Alta Densidade Eletrônica Internuclear	30
2.2.2.1.3	Direção da Ligação	31
2.2.2.1.4	Estabilidade	31
2.2.2.1.5	Multiplicidade	32
2.2.2.1.6	Comprimento de Ligação	33
2.2.2.1.7	Energia de Ligação	33
2.2.2.1.8	Eletronegatividade, Polaridade e Caráter Parcial Iônico	34
2.2.2.1.9	Ressonância	35
2.2.2.2	<i>Modelo Quântico da Ligação Covalente</i>	36
2.2.2.2.1	Compartilhamento de Pares Eletrônicos	37
2.2.2.2.2	Sobreposição de Orbitais	37
2.2.2.2.3	Estabilidade e Emparelhamento de Spins	39
2.2.2.2.4	Direção e Alta Densidade Eletrônica Internuclear	40
2.2.2.2.5	Multiplicidade	41
2.2.2.2.6	Comprimento, Energia de Ligação e Ressonância	42
2.2.2.2.7	Polaridade, Eletronegatividade e Caráter Parcial Iônico	45
2.3	UM SISTEMA CONCEITUAL PARA O CONCEITO DE LIGAÇÃO COVALENTE	47

3.	METODOLOGIA	50
3.1	MÉTODO E TIPO DE PESQUISA	50
3.2	SUJEITOS E AMBIENTE DE PESQUISA	51
3.3	COLETA DE DADOS	52
3.4	ANÁLISE DE DADOS	57
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	59
4.1	4.1 ANÁLISE DA LITERATURA DE ENSINO DE QUÍMICA	59
4.1.1	4.1.1 Análise de Artigos Científicos	59
4.1.2	Análise das Dissertações e Teses	63
4.2	ANÁLISE DAS RESPOSTAS AO QUESTIONÁRIO	68
4.3	ANÁLISE DAS ENTREVISTAS	91
4.3.1	Análise das Respostas às Perguntas das Entrevistas	91
4.3.2	Análise das Soluções dos Problemas Propostos na Entrevista	100
5.	CONSIDERAÇÕES FINAIS	105
	REFERÊNCIAS	107
	APÊNDICE A – Termo de Consentimento Livre e Esclarecido	121
	APÊNDICE B – Roteiro Básico das Entrevistas	123

APRESENTAÇÃO

Esta tese marca o final do meu curso de doutorado, texto que vem sendo pensado desde 2014, quando fiz a seleção para o PPGEFHC – UFBA/UEFS. O texto que segue apresenta uma contribuição para a Área de Ensino de Ciências/Química e se refere ao ensino das Ligações Químicas, enfatizando a conceituação da Ligação Covalente. Mais detalhes sobre o desenvolvimento desta pesquisa encontram-se nas páginas seguintes.

Minha trajetória como pesquisador do tema Ligação Química teve início em 2009 quando fui convidado pela professora Dra. Angela Fernandes Campos a participar do projeto de pesquisa Estratégias Didáticas no Ensino de Química. Nessa época eu cursava o terceiro período do curso de Licenciatura em Química na Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE). O meu plano de trabalho inicialmente contemplava elaborar situações-problema e recursos didáticos inovadores para o ensino de Ligação Química. Tal projeto foi bem-sucedido e teve continuidade estendendo-se aos três tipos de ligação química: covalente, iônica e metálica. Foram três anos de muito empenho que renderam pouco mais de uma dezena de artigos científicos e trabalhos apresentados em eventos nacionais e internacionais. Encerrei essa fase, no final de 2011, com a defesa do trabalho de conclusão de curso intitulado: Situação-Problema como Estratégia Didática para o Ensino da Ligação Iônica.

Nesse período, concorri a uma vaga no curso de Mestrado em Ensino de Ciências da UFRPE (PPGEC) com um projeto sobre o ensino da Ligação Metálica. No entanto, ao ser aprovado, em 2012, minha orientadora e eu decidimos investigar outro objeto de Pesquisa: A Resolução de Problemas em Química. No início de 2014, defendi a dissertação de mestrado: Análise de Tendências de Pesquisa sobre a Resolução de Problemas em Química.

Logo após concluir o mestrado, fui aprovado em concurso público para o cargo de Professor Assistente na Universidade Federal do Vale do São Francisco (UNIVASF), campus Serra da Capivara – PI. Apesar da alegria pela aprovação, sentia que precisava continuar minha trajetória acadêmica cursando o doutorado. Os programas de Pós-Graduação em Ensino de Ciências mais próximos estavam em

Recife (PPGEC - UFRPE) e Salvador (PPGEFHC - UFBA/UEFS). Por incentivo da minha orientadora de graduação e mestrado, decidi por novos ares. Em consulta à página eletrônica do Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências (PPGEFHC), identifiquei possíveis orientadores da área de Ensino de Química, dentre os quais, me chamou à atenção o professor Dr. José Luís de Paula Barros Silva em função das suas pesquisas sobre o ensino de conceitos quânticos. Por coincidência, o conheci durante o XVII Encontro Nacional de Ensino de Química (ENEQ), realizado na cidade de Ouro Preto – MG, em agosto de 2014. Durante o evento perguntei se ele poderia me orientar e ele acenou positivamente, solicitando que eu enviasse por e-mail uma proposta de projeto. Tendo em vista que ele trabalhava com o ensino de conceitos quânticos, decidi retomar o ensino de Ligação Química, agora em uma nova perspectiva.

No início 2015, fui aprovado no curso de doutorado do PPGEFHC. Até então, minhas pesquisas estavam voltadas para os aspectos qualitativos das Ligações Químicas. No entanto, a tese de doutorado demandava maior profundidade. Nesse sentido, meu orientador me incentivou a estudar as fontes primárias sobre o desenvolvimento do conceito de ligação química, em particular, os escritos de Linus Pauling. Paralelamente, meu orientador solicitou também que eu me aprofundasse nas leituras da teoria histórico-cultural de Vigotski. Esse foi o embrião desta tese que foi desenvolvida ao longo de mais de quatro anos.

Neste ano, 2019, completam-se dez anos de estudos sobre o ensino de Ligação Química. Tema que me acompanha desde o curso de Licenciatura em Química. Dez anos depois, vejo esse tema de forma diferenciada dentro da Química e das pesquisas sobre o ensino desse conceito. Essa experiência me influencia em diversos aspectos como docente e formador de professores. Conhecendo as concepções alternativas e as dificuldades de compreensão dos estudantes sobre esse tema, procuro sempre ensinar de forma a minimizar tais obstáculos. Além disso, durante as aulas os primeiros exemplos que me vem à cabeça são sobre Ligação Química. Diante disso, só tenho a dizer que o conceito de Ligação Química continuará sendo meu objeto de pesquisa por muito tempo, pois percebo que existem ainda muitos aspectos a investigar.

1. INTRODUÇÃO

Ligação química é reconhecido como um conceito estruturante dentro da Química, pois a sua compreensão contribui para apreensão de outros conceitos e conteúdos, tais como: propriedades químicas e físicas das substâncias, reações químicas, mecanismos de reação, equilíbrio químico, dentre outros. Linus Pauling (1992) afirmou que ligação química é o conceito mais valioso da Química. Apesar dessa importância, diversas pesquisas apontam que a ligação covalente não é bem compreendida pelos estudantes em diversos níveis de ensino (ERMAN, 2017). Segundo Franco e Ruiz (2006, p. 114, tradução nossa):

[...] as concepções alternativas sobre ligação química, geralmente não se formam fora da sala de aula, tendo em vista o nível de abstração deste conceito e que as experiências dos estudantes com a ligação química são muito indiretas.

De fato, ligação química não é um conceito tão divulgado entre o público leigo a ponto de ser empregado cotidianamente, exceto por químicos ou estudantes de Química.

Considerando essa prerrogativa, é necessário refletir sobre a formação das concepções alternativas sobre ligação química durante as aulas de Química. Em função da origem, as concepções alternativas sobre ligação química podem ser atribuídas à forma como esse conteúdo é abordado nas aulas, aos materiais didáticos utilizados no ensino ou à representação que o estudante constrói sobre esse conceito (FRANCO; RUIZ, 2006).

Diversos estudos nacionais e internacionais relatam concepções alternativas sobre ligação química (ERMAN, 2017; FERNANDES; CAMPOS; MARCELINO-JR, 2010; FERNANDEZ; MARCONDES, 2006; ÖZMEN, 2004; ÜNAL *et al.*, 2006). Particularmente, em relação à ligação covalente esses estudos expõem as seguintes concepções alternativas: (I)- o compartilhamento de elétrons é igualitário em todas as ligações covalentes; (II)- as ligações covalentes são rompidas quando uma substância muda de estado físico; (III)- numa molécula estável, todos os átomos obedecem à regra do octeto; (IV)- as ligações covalentes são formadas para os átomos obterem a última camada completa. Esses são apenas alguns exemplos das

concepções alternativas que precisam ser evitadas durante o processo de ensino e de aprendizagem. Para isso, é necessário que o professor as conheça e aborde a ligação covalente levando em consideração o modelo atômico ensinado anteriormente (TOMA, 1997), o desenvolvimento cognitivo dos estudantes e o nível de ensino (Educação Básica ou Ensino Superior)

O conceito de ligação covalente, objeto de estudo desta pesquisa, como todo conceito, está relacionado a outros conceitos. A sistematização é uma das principais características dos conceitos científicos, segundo Vigotski (2009). Nesse sentido, o desenvolvimento psicológico desse conceito consiste na formação de um sistema conceitual rico em conceitos intimamente relacionados. Porém, o sistema conceitual da ligação covalente é constituído por outros conceitos também complexos e abstratos, conforme pode ser verificado na definição dada por Linus Pauling, que recebeu o Prêmio Nobel, em 1954, pela sua pesquisa sobre a natureza da ligação química:

Uma ligação covalente simples entre dois átomos A e B envolve dois elétrons, um orbital de A, e outro orbital de B. Um dos elétrons tem spin positivo e o outro spin negativo; a estabilidade da ligação pode ser considerada o resultado da troca dos dois elétrons entre os átomos A e B; isto é, da ressonância entre as estruturas $A\uparrow\downarrow B$ e $A\downarrow\uparrow B$, as setas indicam a orientação do spin dos elétrons. (PAULING, 1938, p. 1857, tradução nossa.)

Os elementos presentes na definição de Pauling da ligação covalente fazem parte dos conteúdos ensinados sobre ligação química nos cursos de Licenciatura em Química e estão distribuídos ao longo das disciplinas de Química Geral, Química Inorgânica, Química Orgânica e Físico-Química. Tais elementos ainda permeiam os livros didáticos de Química mais populares no Ensino Superior (ATKINS; JONES, 2012; ATKINS; DE PAULA, 2012; BROWN *et al.*, 2016; BRUICE, 2006; SHRIVER; ATKINS, 2008; RUSSELL, 1994; SOLOMONS; FRYHLE, 2012).

A justificativa para a realização desta pesquisa sobre a conceituação da ligação covalente está fundada em quatro argumentos: 1)- O conceito de ligação covalente é mais complexo e auxilia na explicação dos demais tipos de ligação química (iônica e metálica); 2)- A ausência de investigações nacionais específicas acerca desse conceito (conforme verificado na análise da literatura de ensino de química que será apresentada mais à frente); 3)- Em função da alta complexidade,

esse conceito não tem sido assimilado de forma satisfatória pelos estudantes de diversos níveis (Ensino Médio e Ensino Superior); 4)- A necessidade de refletir sobre o ensino e a aprendizagem desse conceito nos cursos de formação inicial de professores de Química.

Este estudo tem como Objetivo Geral: **Compreender como a literatura da área de Ensino de Química aborda o conceito de ligação covalente e como licenciandos em Química conceituam e empregam esse conceito na resolução de problemas químicos.**

E como Objetivos Específicos: *(1)- Analisar como o conceito de ligação covalente é abordado na literatura nacional e internacional da área de Ensino de Química; (2)- Analisar o sistema conceitual da ligação covalente explicitado por Licenciandos em Química; (3)- Analisar como licenciandos em Química empregam o conceito de ligação covalente e outros conceitos do seu sistema conceitual na resolução de problemas químicos.*

Nos próximos capítulos serão descritos a fundamentação teórica, a metodologia, os resultados e as considerações finais. O capítulo dois traz a fundamentação teórica deste estudo, basicamente formada pela teoria do desenvolvimento dos conceitos científicos e cotidianos de Vigotski e pela teoria da ligação química de Pauling.

O capítulo três corresponde à metodologia empregada neste estudo. Nele, serão detalhados o método de pesquisa, o tipo de estudo, os sujeitos de pesquisa, os instrumentos de coleta e a análise dos dados.

O capítulo quatro contém a discussão dos resultados à luz das teorias utilizadas para fundamentar teoricamente esta investigação.

Por fim, o capítulo 5 apresenta algumas considerações e reflexões sobre o que foi produzido ao longo deste estudo e perspectivas de desdobramentos desta pesquisa.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo está organizado em duas partes: a primeira trata dos conceitos em geral, enquanto que a segunda, apresenta uma discussão do conceito científico de ligação covalente e o insere em um sistema conceitual.

2.1 A FORMAÇÃO DE CONCEITOS NA PERSPECTIVA HISTÓRICO-CULTURAL

Existem diversas definições e teorias que explicam a formação de conceitos. Tanto Vigotski (2009), no campo psicológico, quanto Hardy-Vallée (2013), no campo filosófico, consideram que os conceitos unem pensamento e linguagem. Tais autores corroboram que os conceitos correspondem ao significado das palavras que os expressam. As palavras ou os conjuntos de palavras que expressam os conceitos são denominados termos ou termos conceituais.

Os conceitos são fundamentais para a comunicação e essenciais para a organização e generalização do pensamento. Segundo Vigotski (2009) a formação de conceitos inicia-se na infância e segue-se até a vida adulta e consiste na aquisição de sentido das palavras. Contudo, é na adolescência que as funções psicológicas superiores estão maduras o suficiente para a formação de conceitos. Somente a partir da adolescência é possível empregar as palavras de modo funcional para organizar e orientar as operações psicológicas necessárias para enfrentar as mais distintas situações que a vida exige. Mesmo na vida adulta, o ser humano não pensa sempre por conceitos, em algumas situações é provável que sejam mobilizadas formas mais primitivas de pensamento como o amontoado sincrético e o pensamento por complexos.

Para Vigotski (2009), todas as funções psíquicas superiores têm em comum a mediação por meio de signos. No caso específico da formação de conceitos uma espécie de signo importante é a palavra. A origem de um conceito surge da necessidade de seu emprego em alguma situação ou na resolução de um problema. O processo de formação de um conceito tem início com a aprendizagem de uma palavra, geralmente, a partir do contato com outros seres humanos mais experientes no uso do conceito. Após entrar em contato com uma determinada palavra algum

número de vezes a criança estará apta a empregá-la, resta agora utilizá-la em alguma situação. Inicialmente, é comum o emprego dessa palavra em um contexto equivocado, mas com o tempo aprende-se a usá-la corretamente.

Vigotski (2009) mostrou que o desenvolvimento dos conceitos ocorre em três estágios que se subdividem em diversas fases. O primeiro estágio é denominado sincrético, sincretismo ou de amontoado sincrético. De uma forma geral, esse estágio é caracterizado pela fusão de vários objetos numa só imagem, sem qualquer distinção entre eles ou vínculo. O pensamento sincrético não permite a separação dos objetos visualizados. O estágio do sincretismo é constituído por três fases: (1)- formação da imagem ou amontoado sincrético; (2)- formação do amontado sincrético com base na percepção primitiva dos objetos observados continuamente; (3)- formação de um aglomerado sincrético mais complexo, pois já é possível perceber a existência de vários aglomerados sincréticos formados nos estágios anteriores.

O segundo estágio do desenvolvimento de conceitos é denominado pensamento por complexos e corresponde à formação de vínculos objetivos entre objetos concretos por meio das mais variadas operações mentais. Esse estágio é subdividido em cinco fases: (1)-complexo associativo (o vínculo objetivo entre os objetos é baseado em qualquer característica que lhe chame a atenção: cor, tamanho, forma, etc.); (2)- complexo complementar (o vínculo objetivo entre os objetos é baseado na complementariedade das características, ou seja, busca-se objetos com características distintas, mas que se complementam de alguma forma, como as figurinhas de um álbum); (3)- complexo em cadeia (vários complexos de objetos são encadeados por meio de diferentes vínculos objetivos); (4)- complexo difuso (vários complexos de objetos são encadeados por meio de diferentes vínculos mais subjetivos e confusos); (5)- pseudoconceito (ocorre quando o objetos que podem ser classificados segundo um conceito abstrato são classificados de acordo com algum vínculo objetivo, típico do pensamento por complexos).

O último estágio do desenvolvimento conceitual é constituído por três fases: fase das abstrações (ocorre a discriminação de algumas características dos objetos e a percepção de outras que permitem que os objetos se relacionem uns com os outros); (2)- conceito potencial (emprego do termo conceitual adequadamente sem ter claro seu significado); (3)- formação do conceito (pensamento abstrato por meio de conceitos). É no terceiro estágio do desenvolvimento conceitual que o ser

humano atinge e passa a operar com as situações de modo abstrato, sem os vínculos factuais da fase anterior (Vigotski, 2009).

Essas são as fases da formação de conceitos cotidianos ou espontâneos. Porém, os conceitos podem ser aprendidos de outro modo, dito científico (Vigotski, 2009). Os conceitos científicos se desenvolvem de uma forma diferente, mas não totalmente alheia ao desenvolvimento dos conceitos cotidianos. De uma forma geral, os conceitos científicos são assimilados a partir da definição verbal de um referente abstrato. Tal definição relaciona várias características ou atributos dos conceitos científicos. Devido à abstração e à complexidade, a formação de conceitos científicos requer um contato mais profundo com outro ser humano mais experiente do que a formação de conceitos cotidianos.

Um conceito pode ser considerado como uma generalização, pois expressa uma categoria de objetos classificados por meio de critérios, que por sua vez, são características do conceito. As características do conceito funcionam como critérios para inclusão de novos casos no conceito (Hardy-Vallée, 2013). Sendo assim, a posse de um determinado conceito permite reconhecer quais objetos podem ser classificados dentro da categoria que expressa.

2.1.1 Conceitos Cotidianos e Científicos

De acordo com Vigotski (2009), os conceitos podem ser classificados como cotidianos¹ e científicos. De uma forma geral, os conceitos cotidianos são assimilados a partir de experiências cotidianas dos indivíduos, de modo pouco sistemático e sem clara explicitação verbal. Por exemplo, o conceito de *ligar* costuma ser aprendido de modo cotidiano, em situações nas quais é preciso prender, unir, juntar, atar, aglutinar, reunir, aproximar, fixar, apertar coisas ou pessoas, donde decorre o conceito cotidiano de *ligação*, como “ato ou efeito de ligar(-se)”, “união”, “junção”, “conexão”, “vinculação” etc. (FERREIRA, 1999, p. 1212; HOUAISS; VILLAR, 2001, p. 1756).

¹ A expressão conceito cotidiano é preferível, pois a expressão conceito espontâneo pode ser interpretada como uma invenção feita ao acaso.

Por outro lado, os conceitos científicos são introduzidos em situações de ensino-aprendizagem formais ou não formais (escolas, museus, visitas técnicas, conversas, etc.), sistematicamente e verbalmente explícitos. No caso que nos interessa, o conceito de *ligação covalente* costuma ser ensinado por meio de suas características, conforme discutido na próxima seção: atração de átomos ou grupos de átomos, compartilhamento de elétrons, superposição de orbitais etc., as quais não podem ser diretamente experimentadas.

Segundo Vigotski (2009), os conceitos científicos apresentam as seguintes características: alta abstração, verbalização, sistematicidade e arbitrariedade. Contrariamente, os conceitos cotidianos apresentam alta concretude, pouca verbalização, pouca sistematicidade e pouca arbitrariedade. Dito de outra forma, nos aspectos em que os conceitos científicos são fortes os conceitos cotidianos são fracos.

Conceitos científicos são altamente abstratos porque se relacionam com os casos específicos – objetos, situações, eventos – por meio da linguagem e como classes de casos. Estas se formam por separação dos traços comuns de vários casos que são reunidos em uma nova síntese. Ao se afastar das experiências concretas com os casos específicos, o conceito adquire alta abstração. Contrariamente, os conceitos cotidianos apresentam concretude, tendo em vista que, se referem a casos concretos diretamente experimentados.

Os conceitos científicos apresentam como ponto forte a explicitação, que se dá, geralmente, de forma verbal. Ao enunciar um conceito, empregamos necessariamente outros conceitos de modo interligado, constituindo, assim, um sistema conceitual que engloba o conceito que o gerou. Em virtude da sua operacionalização concreta, os conceitos cotidianos são pouco verbalizados. Nesse sentido, é mais fácil definir um conceito científico do que um conceito cotidiano.

A sistematicidade é uma característica fundamental, pois estabelece hierarquia entre os conceitos científicos por meio das relações de generalidade que os conectam. Essa é a principal característica dos conceitos científicos. Por outro lado, os conceitos cotidianos são pouco sistemáticos, pois a sua natureza concreta dificulta o estabelecimento de relações com outros conceitos.

A arbitrariedade – ou voluntariedade (VIGOTSKI, 2009) – dos conceitos científicos é caracterizada pelo seu emprego de acordo com a escolha do indivíduo, sendo tal escolha justificada pela explicitação de vínculos entre elementos do seu sistema conceitual e elementos do contexto no qual está sendo empregado. Os conceitos cotidianos são pouco voluntários, devido à sua pouca sistematicidade.

O pensamento é um todo integrado, de modo que, a aprendizagem de conceitos científicos pode contribuir para os conceitos cotidianos, fornecendo-lhes sistematicidade e verbalização, ao passo que os conceitos cotidianos podem contribuir para dar concretude aos conceitos científicos.

Vigotski (2009) compara o sistema conceitual com o sistema de coordenadas geográficas, localizando cada conceito em termos de longitudes e latitudes. A latitude corresponde ao grau de concretude ou de abstração, ou seja, cada polo terrestre equivale a uma dessas dimensões, enquanto que a longitude representa as relações que o conceito mantém com outros conceitos de mesma latitude (BELLAS; GONZALEZ; SILVA, 2015). A partir dessa analogia e da sistematicidade típica dos conceitos científicos, pode-se construir um sistema conceitual para um determinado conceito utilizando-se mapas conceituais, entendidos como diagramas que mostram as relações de generalidade entre conceitos.

Os conceitos científicos se apoiam em determinado nível de maturação dos conceitos cotidianos. Isso pode ser observado na idade em que as crianças começam a frequentar a escola, pois a instrução recebida a partir desse período baseia-se nos conceitos cotidianos adquiridos anteriormente. Porém, é necessário levar em consideração que, a partir da idade escolar, os conceitos científicos contribuem para o desenvolvimento dos conceitos cotidianos.

É importante destacar que a percepção do emprego contextual das palavras é aprendida antes da percepção da palavra como uma síntese de características sistematizadas. Daí que, a formação dos conceitos cotidianos antecede e serve de base para a formação dos conceitos científicos. A aprendizagem de um conceito científico pode ocorrer parcialmente, quando se entra em contato com apenas uma parte das características do conceito. Por outro lado, isso ocorre no conceito cotidiano, quando se aprende apenas a percepção de situações de uso do conceito.

2.2 LIGAÇÃO QUÍMICA: CONCEITO E TIPOS

Na última versão do Compêndio de Terminologia Química (Gold Book), a União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC) recomenda o seguinte conceito de ligação química:

Quando as forças atuantes entre dois átomos ou grupos de átomos conduzem à formação de uma entidade molecular independente e estável, considera-se que existe uma ligação química entre esses átomos ou grupos. A principal característica de uma ligação química é a existência de uma região de contornos de potencial constante entre os núcleos que possibilita que a energia potencial diminua substancialmente pela contração atômica à custa de apenas um pequeno aumento na energia cinética. (IUPAC, 2019, tradução nossa)^{2,3}.

Note-se que diminuição substantiva da energia potencial compensa o pequeno aumento da energia cinética, de modo que, a energia total do sistema – que é soma da energia potencial com a energia cinética – Diminui.

O conceito de ligação química da IUPAC apresenta quatro características:

- (i)- Uma ligação química se estabelece entre átomos ou grupos de átomos;
- (ii)- Ligação química é uma força [que atua entre átomos ou grupos de átomos];
- (iii)- O agregado [de átomos ou grupos de átomos] formado por ligação química deve ser independente e estável;
- (iv)- A contração da região internuclear leva à redução da energia total do sistema.

Essas características podem ser consideradas condições individualmente necessárias para classificar um objeto como uma ligação química. A ligação química pode ser classificada em função do modo como os elétrons se distribuem entre os átomos que formam a ligação. Nesse sentido, podem ser identificados três tipos de ligação química, que serão abordados a seguir.

² When forces acting between two atoms or groups of atoms lead to the formation of a stable independent molecular entity, a chemical bond is considered to exist between these atoms or groups. The principal characteristic of a bond in a molecule is the existence of a region between the nuclei of constant potential contours that allows the potential energy to improve substantially by atomic contraction at the expense of only a small increase in kinetic energy.

³ O verbo *to improve* foi traduzido como *diminuir* — em vez do usual *aumentar* — porque, no contexto do enunciado, a melhora do valor da energia potencial ocorre com sua diminuição.

2.2.1 Tipos de Ligação Química

A IUPAC (2019) define dois tipos de ligação química: covalente e iônica. É comum que químicos, tais como Lewis (1913) e Pauling (1960) considerem um terceiro tipo: a ligação metálica.

As substâncias que apresentam predominantemente um desses tipos exibem propriedades características. No entanto, admite-se que a transição entre um tipo e outro é contínua, de forma que, pode-se considerar a existência de ligações químicas intermediárias entre um tipo e outro.

2.2.1.1 Ligação Covalente

De acordo com a IUPAC (2019), uma ligação covalente é:

“Uma região entre núcleos de densidade eletrônica relativamente alta, que surge, ao menos parcialmente, do compartilhamento de elétrons e que causa uma força atrativa e uma característica distância internuclear”⁴.

A ligação covalente é formada pelo compartilhamento de elétrons por átomos ou grupos de átomos. Os elétrons compartilhados podem provir igualmente de cada átomo entre os quais se forma a ligação ou apenas de um dos átomos. A diferente origem do par de elétrons não implica em diferença no caráter da ligação covalente formada.

As ligações covalentes são classificadas de acordo com a polaridade em polar (quando existe diferença de eletronegatividade entre os átomos que formam a ligação) ou apolar (quando não existe diferença de eletronegatividade entre os átomos que formam a ligação) e quanto à disposição espacial da densidade eletrônica em sigma (quando a densidade eletrônica é paralela ao eixo internuclear) ou pi (quando a densidade eletrônica é perpendicular ao eixo internuclear).

⁴ A region of relatively high electron density between nuclei which arises at least partly from sharing of electrons and gives rise to an attractive force and characteristic internuclear distance.

2.2.1.2 Ligação Iônica

Segundo a IUPAC (2019), ligação iônica é:

“A ligação entre átomos com eletronegatividades nitidamente diferentes. Em termos estritos, uma ligação iônica refere-se à atração eletrostática entre as cargas elétricas de um cátion e um ânion, em contraste com uma ligação puramente covalente”⁵.

A ligação iônica é formada por meio da transferência de elétrons entre átomos, levando à formação de íons com cargas opostas que se atraem eletrostaticamente. A formação de íons ocorre porque os metais, geralmente, apresentam baixa energia de ionização⁶, o que os torna potenciais doadores de elétrons (formam cátions). Os não metais apresentam alta afinidade eletrônica⁷, isto é, são potenciais receptores de elétrons (formam ânions). Quando um átomo de elemento metálico interage com um átomo de elemento não metálico, o metal pode doar um ou mais elétrons para o não metal, produzindo íons de cargas opostas. Esses íons se atraem e formam ligações iônicas.

2.2.1.3 Ligação Metálica

A IUPAC (2019) não incluiu a ligação metálica em seu glossário de termos. Os metais existem na forma de agregados cristalinos com propriedades diferentes dos agregados iônicos e moleculares, de modo que, com base na definição de ligação química dada anteriormente, se pode inferir a existência de algum tipo de ligação entre seus átomos. Assim fizeram Langmuir (1919) e Pauling (1960), dois químicos que contribuíram muito para a teoria da ligação química.

⁵ The bond between atoms with sharply different electronegativities. In strict terms, an ionic bond refers to the electrostatic attraction experienced between the electric charges of a cation and an anion, in contrast with a purely covalent bond.

⁶ Energia mínima necessária para ejetar um elétron de um átomo ou molécula neutra em seu estado fundamental. (IUPAC, 2019, tradução nossa).

⁷ Energia liberada quando um elétron adicional é ligado a um átomo ou molécula neutra. (IUPAC, 2019, tradução nossa).

A ligação metálica é explicada de forma qualitativa pela teoria do “gás de elétrons” ou “mar de elétrons” criada no início do século XX pelo físico alemão Paul Drude (1863-1906) e pelo físico holandês Hendrik Lorentz (1853-1928). Atualmente essa teoria tem sido utilizada apenas qualitativamente para descrever os metais nos níveis básicos de ensino. No Ensino Superior é comum o ensino da Teoria das Bandas, proveniente da Teoria dos Orbitais Moleculares (TOMA, 1997).

Pauling (1960) apresentou uma concepção própria da ligação metálica ao propor que a ligação entre átomos em um metal consistiria no compartilhamento de pares eletrônicos que se deslocariam pelas regiões interatômicas da rede metálica, ou seja: os pares de elétrons se moveriam entre os átomos alternando sua posição e dando coesão ao agregado com um todo. Desse modo, a ligação metálica apresentaria tanto caráter covalente, quanto iônico.

2.2.1.4 Distinção Básica Entre os Tipos de Ligação Química

Podemos considerar que a distinção básica entre os três tipos de ligação é o modo como os elétrons são distribuídos entre os átomos participantes da ligação:

- **Ligação covalente:** compartilhamento igual ou levemente desigual de elétrons entre os átomos da ligação, com leve polarização das cargas elétricas.
- **Ligação iônica:** compartilhamento acentuadamente desigual de elétrons (ou até transferência de elétrons) entre os átomos da ligação, com forte polarização de cargas elétricas.
- **Ligação metálica:** compartilhamento variável (ora igual, ora desigual) de elétrons entre os átomos da ligação, com polarização variável, ora leve, ora acentuada.

As características que compõem o conceito de ligação de covalente, objeto de estudo desta pesquisa, serão discutidas em detalhes a seguir.

2.2.2 Características da Ligação Covalente

O conceito de ligação covalente se relaciona com outros conceitos do sistema no qual está inserido para formar os modelos clássico e quântico. Esses conceitos podem ser considerados características da ligação covalente, pois surgem a partir das definições de ligação covalente. Os elementos do sistema conceitual no qual o conceito de ligação covalente está inserido serão discutidos nesta seção separadamente, de início, segundo o modelo clássico e, em seguida, de acordo com o modelo quântico. Em cada caso, são fornecidos exemplos de como livros didáticos de Química para o Ensino Superior, utilizados pelos estudantes participantes da pesquisa, discutem as características apresentadas.

2.2.2.1 Modelo Clássico da Ligação Covalente

Entende-se por modelo clássico da ligação covalente a teoria eletrostática de ligação que surgiu antes revolução da Mecânica Quântica que se seguiu após 1925. Esse modelo baseia-se no compartilhamento de elétrons proposto por Lewis (1916) e Langmuir (1919), na regra do octeto formulada por Abegg, nas forças eletrostáticas de ligação sugeridas por Thomson e na eletronegatividade de Pauling.

Compõem o modelo clássico da ligação covalente as seguintes características: compartilhamento de elétrons, energia de ligação, estabilidade, densidade eletrônica internuclear, comprimento, polaridade, direção da ligação, ressonância e multiplicidade. Essas características formam o sistema conceitual do conceito clássico de ligação covalente. As características do modelo clássico da ligação covalente serão discutidas a seguir tomando como referência as teorias de ligação propostas por Lewis, Langmuir e Pauling (antes de incorporar a teoria quântica).

2.2.2.1.1 Compartilhamento de Elétrons

A descoberta do elétron por Joseph John Thomson (1856-1940), em 1897, é considerada um marco para o conceito de ligação química, pois a partir de então, surgiram as primeiras teorias eletrostáticas de valência baseadas nas propriedades desse corpúsculo (SIDGWICK, 1929). O próprio Thomson propôs uma delas:

Quando átomos como os eletronegativos, em que os corpúsculos são muito estáveis, são misturados com átomos como os eletropositivos em que os corpúsculos não são tão firmemente mantidos, as forças as quais os corpúsculos estão sujeitos pela ação dos átomos uns sobre os outros pode resultar no desprendimento de corpúsculos dos átomos eletropositivos e sua transferência para os eletronegativos. Os átomos eletronegativos poderão, portanto obter uma carga negativa de eletricidade, os átomos eletropositivos são positivos, os átomos de carga oposta atrairão uns aos outros, e um composto químico de átomos eletronegativos e eletropositivos será formado. (THOMSON, 1904, p. 262, 263, tradução nossa).

Chayut (1991) e Saltzman (1973) consideram que a teoria eletrônica de Thomson era uma espécie de renascimento da teoria dualista de Berzelius, que dominou a química nas primeiras décadas do século XIX. Até o início do século XX, acreditava-se que todas as ligações químicas eram formadas por meio da transferência de elétrons, conforme Thomson havia proposto (SIDGWICK, 1929), exceto as estabelecidas entre metais, que desde 1900 eram explicadas pela teoria do *gás* ou *mar de elétrons* (DRUDE, 1900; LORENTZ, 1916). Em 1913, surgiu a primeira distinção formal entre os tipos de ligação química: ligação polar, não polar e metálica (BRAY; BRANCH 1913; LEWIS, 1913). Os mecanismos que explicavam a formação das ligações químicas polares e não polares foram propostos, de forma independente, em 1916, pelo físico alemão Walther Kossel (1888-1956) e pelo químico norte-americano Gilbert Newton Lewis (1875-1946).

Kossel (1916) propôs uma teoria da ligação química na qual explicava a formação das ligações polares por meio da transferência de elétrons da camada de valência entre os átomos e a consequente formação de íons de cargas opostas que se atraíam eletrostaticamente. Nessa teoria, o número de elétrons transferidos obedecia à *regra dos oito*, tornando os átomos que participavam da ligação estáveis com oito elétrons. Porém nem todas as substâncias podiam ser explicadas por meio da transferência de elétrons, sobretudo as orgânicas, o que era uma séria limitação

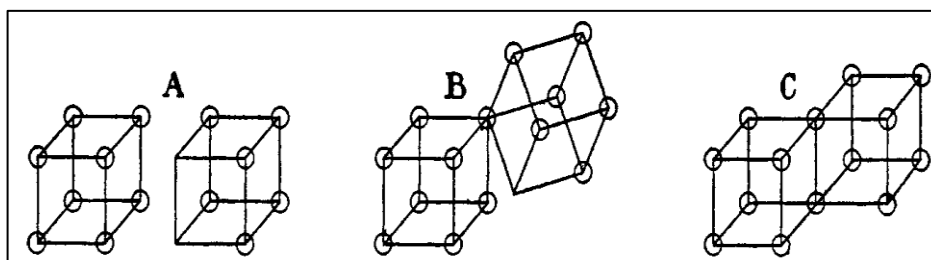
reconhecida pelo próprio Kossel (SIDGWICK, 1929). Essa teoria da ligação polar estava inserida dentro de um modelo atômico dinâmico, inspirado no átomo de Bohr, no qual os elétrons estavam distribuídos em anéis concêntricos orbitando o núcleo (KOSSEL, 1916). A ligação química polar foi chamada de *eletrovalente* por Langmuir (1921), porém ficou mais conhecida como ligação iônica.

Em uma abordagem diferente de Kossel, Lewis (1916) se propôs a explicar a formação da ligação química não polar. Para ele, a principal diferença entre as ligações polares e não polares relacionava-se à magnitude da força que mantinha os elétrons nos átomos. Segundo Lewis, a ligação polar era formada entre átomos cujos núcleos atraíam fracamente⁸ os elétrons, tornando possível a polarização e até a transferência completa desses corpúsculos. Por outro lado, a ligação não polar era formada entre átomos que atraíam fortemente seus elétrons, mantendo-os em posições fixas. Nesse último caso, os átomos se ligavam pelo emparelhamento de um par de elétrons da camada de valência, um de cada átomo. Apesar da distinção, Lewis afirmou que essas ligações químicas não variavam em tipo, mas em grau de polaridade.

A teoria do par de elétrons proposta por Lewis (1916) estava associada a um modelo atômico estático, denominado *átomo cúbico*: um núcleo atômico encerrado no centro de um cubo com os elétrons de valência (no máximo oito) distribuídos nos oito vértices. Segundo o modelo do *átomo cúbico*, a ligação química não polar se formava quando dois átomos emparelhavam dois elétrons da camada de valência, um de cada vértice adjacente de cada átomo, mantendo, dessa forma, uma aresta em comum. De acordo com a teoria de Lewis, dois átomos de Iodo emparelham dois elétrons, um de cada átomo, para formar uma ligação química não polar (I-I). Lewis representou a formação da molécula de Iodo (I₂) da seguinte forma:

⁸ Nesse caso, admite-se que átomos menos eletronegativos e que apresentam baixa energia de ionização (geralmente metais) podem se polarizar e até transferir seus elétrons para átomos mais eletronegativos e que possuem alta afinidade eletrônica (geralmente não metais).

Figura 1 - Formação da molécula de Iodo (I_2) segundo Lewis.



Fonte: Lewis (1916, p. 775).

Na Figura 1, a estrutura **A** representa a molécula de Iodo ionizada em I^- e I^+ . A estrutura **B** corresponde a uma molécula instável de Iodo formada por uma ligação química monoelétrica que torna apenas um dos átomos estável com oito elétrons na camada de valência. Enquanto que **C** consiste em uma molécula estável de Iodo formada por uma ligação química proveniente do emparelhamento de um par de elétrons por dois átomos de Iodo que atingem oito elétrons na camada de valência. A estrutura **C** é mais estável que a estrutura **B**, pois os dois átomos de Iodo tornam-se estáveis com oito elétrons na camada da valência.

Diferentemente do modelo atômico dinâmico de Kossel, Lewis era adepto de um modelo estático no qual os elétrons permaneciam em posições fixas nos vértices do cubo. O *átomo cúbico* proposto por Lewis enfrentou pelo menos duas grandes dificuldades: (i)- era incompatível ao modelo atômico dinâmico proposto por Bohr em 1913; (ii)- não explicava porque os elétrons emparelhados não repeliam um ao outro. Lewis tentou resolver a primeira dificuldade afirmando que as órbitas dos elétrons estão em posições e orientações fixas que podem dar ao átomo um caráter essencialmente estático (LEWIS, 1923a). Enquanto que a segunda dificuldade era eliminada pela hipótese de que a lei de Coulomb não seria válida a distâncias muito pequenas. Contudo, só foi devidamente justificada após os desdobramentos da nova Mecânica Quântica a partir de 1925 (LEWIS, 1938).

Segundo Lewis (1923a), a teoria dos pares eletrônicos só recebeu ampla atenção dos cientistas após a publicação de uma série de artigos escritos por Irving Langmuir (1881-1957) entre 1919 e 1922. Entre outras contribuições, Langmuir expandiu a teoria de Lewis para elementos químicos mais complexos, criou novos

termos: *compartilhamento de elétrons, regra do octeto, eletrovalência e covalência*, e ainda deduziu matematicamente a regra do octeto (LANGMUIR, 1919,1921).

Segundo Lewis (1923a) o *compartilhamento de elétrons* foi prenunciado por William Ramsay⁹ em 1908. Porém o uso do verbo *compartilhar (share)* em ligação química surgiu no artigo de Langmuir publicado em 1919. Lewis só veio a empregá-lo em seus escritos a partir de 1923 (LEWIS, 1923a, 1923b, 1938).

Atualmente, o compartilhamento de elétrons é a principal característica explorada no ensino da ligação covalente, tanto pelos professores, quanto pelos livros didáticos (ERMAN, 2017). Alguns textos destacam que o compartilhamento caracteriza a ligação covalente tornando-a distinta dos demais tipos de ligação química (BROWN *et al.*, 2016; RUSSELL, 1994). Contudo, Lewis (1916) e Pauling (1960) afirmam que as ligações químicas variam em grau de polaridade, não em tipo. Dessa forma, pode-se estabelecer uma transição contínua entre os tipos de ligação química.

2.2.2.1.2 Alta Densidade Eletrônica Internuclear

A alta densidade eletrônica internuclear deriva imediatamente do compartilhamento de elétrons, tendo em vista que, o par de elétrons compartilhado localiza-se entre os núcleos dos átomos que participam da ligação covalente (LEWIS, 1923a). De acordo com alguns livros didáticos utilizados atualmente, a localização do par compartilhado no eixo internuclear favorece a atração eletrostática pelos dois núcleos e resulta na formação da ligação covalente entre dois átomos (BROWN *et al.*, 2016; RUSSELL, 1994).

⁹ RAMSAY, W. The Electron as an Element. **Journal of the Chemical Society**, Transactions, v. 93, p. 774-788, 1908.

2.2.2.1.3 Direção da Ligação

O emparelhamento de elétrons e o átomo cúbico, propostos por Lewis, em 1916, foram o ponto de partida para o desenvolvimento de uma teoria clássica que explicava a distribuição espacial das ligações químicas em uma molécula (HARGITTAI; CHAMBERLAND, 1986). Inicialmente, Sidgwick e Powell (1940) relacionaram o número de pares eletrônicos da camada de valência do átomo central de uma molécula com a configuração espacial das ligações covalentes que esse átomo poderia dar origem. Posteriormente a ação de repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência sobre os pares compartilhados em ligações covalentes foi destacada por Gillespie e Nyholm (1957). Esse modelo ficou mais conhecido como Teoria da Repulsão dos Pares Eletrônicos da Camada de Valência (RPECV)¹⁰. Mesmo tendo sido concebido após o desenvolvimento da Mecânica Quântica moderna, esse modelo não utiliza princípios quânticos, por isso pode ser considerado clássico.

A RPECV é comumente explorada em livros de Química Geral para explicar a distribuições das ligações covalentes nas moléculas (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016; RUSSELL, 1994). De uma forma geral, explica-se que numa molécula as ligações covalentes estão orientadas em uma configuração espacial que minimize ao máximo as repulsões eletrostáticas entre os pares de elétrons compartilhados e os elétrons ou pares de elétrons não compartilhados, pois as repulsões tornam a molécula instável (RUSSELL, 1994).

2.2.2.1.4 Estabilidade

Lewis utilizou a *regra dos oito*¹¹ para justificar a estabilidade dos átomos após a formação das ligações químicas. Segundo essa regra, os átomos tornam-se estáveis quando possuem oito elétrons na camada de valência, assim como os gases nobres, exceto o Hélio que é estável com apenas dois elétrons na última camada. Os

¹⁰ Em inglês, esse modelo é conhecido como Valence Shell Electron Pair Repulsion (VSPER).

¹¹ Posteriormente denominada de regra do octeto por Langmuir em 1919.

átomos de Hidrogênio também são estáveis com dois elétrons na última camada, como os átomos de Hélio.

A *regra dos oito*, utilizada por Thomson, Kossel, Lewis, Langmuir e outros cientistas, derivou do que Richard Abegg (1869-1910) chamou de *grupo dos oito*. Segundo Abegg (1902), os elementos químicos exibiam dois tipos de valência: a valência normal (número do grupo na tabela periódica) e a contravalência (valência normal menos oito) cuja soma era oito. Abegg (1902; 1904) propôs uma das primeiras teorias eletrostáticas das ligações químicas do século XX, segundo a qual, as substâncias eram formadas por meio da atração eletrostática entre átomos que apresentavam valências normais de sinais opostos.

Atualmente, a regra do octeto é apresentada nos livros didáticos do Ensino Superior como um princípio que determina quantas ligações covalentes os átomos podem formar (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016). Nesse sentido, os átomos devem formar um número de ligações covalentes que os tornem estáveis, ou seja, com oito elétrons na camada de valência.

Acreditamos que essa não é a melhor forma de explicar a valência dos átomos, pois os aspectos energéticos são muito mais adequados para explicar essa propriedade. Contudo, os livros didáticos do Ensino Superior e do Ensino Médio insistem em apresentar a regra do octeto como uma espécie de panaceia que explica a valência e a estabilidade do sistema após a formação da ligação covalente.

2.2.2.1.5 Multiplicidade

Assim como as ligações covalentes eram formadas pelo emparelhamento de um par de elétrons, Lewis (1916) estabeleceu também que as ligações duplas e triplas eram formadas pelo compartilhamento de dois e três pares de elétrons respectivamente. Com isso, observa-se que multiplicidade de uma ligação covalente está diretamente relacionada com a quantidade de pares eletrônicos compartilhados (LEWIS, 1923a).

2.2.2.1.6 Comprimento de Ligação

A determinação dos comprimentos de ligação surgiu a partir de estudos espectroscópicos e de difratometria de raios X no início do século XX. Em função de sua determinação experimental, o comprimento de uma ligação covalente pode ser entendido como a distância entre os núcleos dos átomos que a formam.

Os livros didáticos do ensino superior definem que o comprimento de uma ligação covalente corresponde à distância internuclear de equilíbrio entre os átomos ligados na qual as forças atrativas superam as repulsivas e a energia do sistema é mínima (ATKINS; JONES, 2012; RUSSELL, 1994;).

2.2.2.1.7 Energia de Ligação

Lewis (1916) estabeleceu que a estabilidade termodinâmica de uma molécula estava intimamente associada à força necessária para quebrar suas ligações. Dessa forma, presume-se que moléculas estáveis exigem mais energia para que suas ligações sejam quebradas. Contrariamente, moléculas instáveis exigem menos energia para que suas ligações sejam quebradas. Então, segundo Lewis era a estabilidade termodinâmica da molécula que determinava a magnitude da força das ligações covalentes.

Atualmente, a IUPAC (2019) estabelece que a energia de ligação corresponde ao valor médio das energias de dissociação de todas as ligações do mesmo tipo dentro de uma mesma espécie química. Em outras palavras, pode-se afirmar que a energia de uma ligação covalente corresponde à energia necessária para dissociar os átomos que a formam.

Segundo Russell (1994), durante a formação da ligação, a magnitude do abaixamento da energia do sistema provocado pela aproximação dos átomos irá determinar a energia de dissociação da ligação. Em função das forças de atração eletrostáticas, quanto menor o comprimento maior a energia de dissociação da ligação covalente.

2.2.2.1.8 Eletronegatividade, Polaridade e Caráter Parcial Iônico

O conceito qualitativo de eletronegatividade surgiu com Berzelius no início do século XIX. No entanto, sua definição moderna veio com os estudos de Pauling (1932a), que construiu umas das primeiras escalas quantitativas de eletronegatividade (JENSEN, 2012). Segundo Pauling (1932a), a eletronegatividade refere-se ao poder de um átomo em atrair os elétrons para si em uma ligação química. Alguns anos antes da definição moderna e da escala de eletronegatividade de Pauling, Lewis afirmou que:

O par de elétrons que constitui a ligação pode estar entre os núcleos atômicos em uma posição em que não há polarização, ou pode estar deslocado em direção a algum outro átomo para torná-lo negativo e conseqüentemente tornar o outro átomo positivo. (LEWIS, 1923a, p. 83).

Embora Pauling tenha inserido o conceito de eletronegatividade em sua teoria quântica das ligações químicas, pode-se discutir esse conceito numa perspectiva qualitativa clássica como Lewis o fez.

Nos livros didáticos do Ensino Superior é comum as ligações covalentes serem classificadas em polares (quando há diferença de eletronegatividade) e apolares (quando não há diferença de eletronegatividade) (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016).

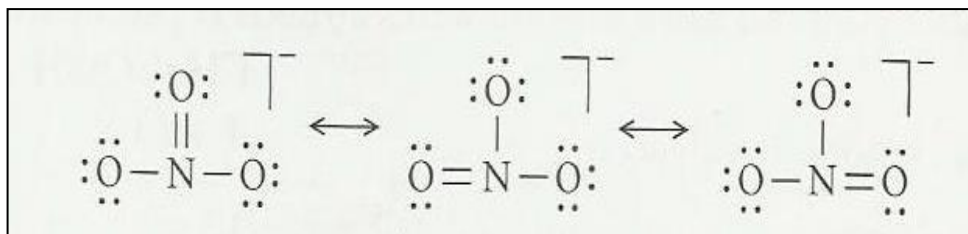
A diferença de eletronegatividade entre os átomos pode resultar na polaridade da molécula, uma característica que afeta diretamente algumas propriedades macroscópicas das substâncias como a solubilidade. A diferença de polaridade entre os átomos que formam uma ligação covalente dá origem ao caráter parcial iônico. Segundo Russell (1994), se a diferença de eletronegatividade entre os átomos for muito grande (superior a 1,7 na escala de Pauling) a ligação será predominantemente iônica com algum caráter covalente. Do contrário, se a diferença de eletronegatividade for pequena (inferior a 1,7 na escala de Pauling) a ligação será predominantemente covalente com algum caráter iônico. Nesse sentido, quanto maior a diferença de eletronegatividade entre os átomos, maior será o caráter parcial iônico da ligação covalente (ATKINS; JONES, 2012).

2.2.2.1.9 Ressonância

A introdução do conceito de ressonância no contexto das ligações químicas deve-se aos estudos de Pauling na perspectiva quântica (1928a, 1928b). No entanto, os livros didáticos do Ensino Superior, sem mencionar a origem quântica desse conceito, o empregam para explicar a estrutura mais provável de espécies químicas que não podem ser descritas por meio de apenas uma estrutura de Lewis (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016).

Nesses livros é explicado que as possibilidades de distribuição dos elétrons entre os átomos dão origem a mais de uma estrutura possível para uma determinada espécie química. Por exemplo, o íon Nitrato (NO_3^-), pode ser representado e explicado por meio de três estruturas de Lewis equivalentes formadas a partir da mobilidade dos elétrons dessa espécie:

Figura 2 - Estruturas de Lewis do íon nitrato (NO_3^-).



Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 68).

A explicação da ressonância destaca as diversas possibilidades em que os átomos podem se ligar. Isso é explicado pela deslocalização de alguns elétrons entre os átomos. Os elétrons deslocalizados não pertencem a nenhum átomo ou ligação específica. As setas de pontas duplas da Figura 2 não indicam que as estruturas estão se convertendo uma na outra, mas que a estrutura que melhor representa o íon Nitrato corresponde a uma fusão dessas três estruturas, que são equivalentes, chamada de híbrido de ressonância. Segundo Atkins e Jones (2012), “A ressonância é uma fusão de estruturas que têm o mesmo arranjo de átomos e arranjos diferentes de elétrons. Ela distribui o caráter de ligação múltipla sobre uma molécula e diminui sua energia”. Pode-se atribuir diversas estruturas de Lewis para

uma única espécie química, porém apenas as mais estáveis vão contribuir decisivamente para o híbrido de ressonância. Como consequência da ressonância, as moléculas são mais estáveis devido à diminuição da energia total.

2.2.2.2 Modelo Quântico da Ligação Covalente

Neste tópico as características da ligação covalente discutidas anteriormente serão rediscutidas do ponto de vista quântico, sobretudo da Teoria da Ligação de Valência (TLV). O modelo quântico da ligação covalente teve origem em 1927 com o tratamento mecânico-quântico da molécula de hidrogênio (H_2) por Heitler e London. Embora parte dos químicos considere a Teoria do Orbital Molecular (TOM) como uma teoria de ligação química (p. ex.: DUARTE, 2001; MCQUARRIE, 2008), o modelo do orbital molecular não inclui as ligações químicas, posto que trata a molécula como um objeto íntegro, “um todo não suscetível de ser analisado a partir de componentes atômicos”, posto que, na molécula “os átomos não podem ser identificados” (ACCORINTI; GONZALEZ, 2016, p. 29; tradução nossa). Por outro lado, como a denominação indica, a ligação química é o conceito central da Teoria da Ligação de Valência, a qual considera a molécula como um conjunto de átomos ligados formando uma estrutura (ACCORINTI; GONZALEZ, 2016).

Adotamos como referência os trabalhos de Heitler e London (1927), Heitler, (1956), Slater (1931), Pauling e Wilson (1935) e, sobretudo, de Linus Pauling (1960), que discutiu detalhadamente o conceito de ligação química de modo qualitativo, especificamente, o conceito de ligação covalente.

O modelo quântico de ligação química interpreta as características do modelo clássico de modo diferente. Além disso, adiciona outras duas: a sobreposição de orbitais e o emparelhamento de spins.

2.2.2.2.1 Compartilhamento de Pares Eletrônicos

A teoria quântica, iniciada em 1900 por Max Planck, só incorporou o compartilhamento de elétrons após o anúncio do Princípio da Exclusão de Pauli (1925) e da descoberta do spin do elétron (1925) (MINGOS, 2016). Em 1927, um artigo publicado pelos físicos Heitler e London apresentava o primeiro tratamento mecânico-quântico qualitativo aplicado com sucesso à molécula de hidrogênio (H_2). A aplicação da equação de Schrödinger à molécula de hidrogênio abriu as portas para elucidar as bases físicas da ligação covalente e dar início à Química Quântica (BANTZ, 1980). O artigo de Heitler e London fundou a TLV, teoria que foi desenvolvida posteriormente por Pauling e outros.

Uma molécula de hidrogênio consiste em dois átomos que contêm apenas um próton e um elétron cada um. Para fins de notação, vamos considerar que o elétron 1 pertence inicialmente ao átomo a e será descrito pela função de onda ou orbital $\psi_a(1)$, enquanto que o elétron 2 pertence inicialmente ao átomo b e será descrito pela função de onda $\psi_b(2)$. As funções de onda não perturbadas para esse sistema surgem a partir da combinação linear das funções $\psi_a(1)$ e $\psi_b(2)$:

$$\psi_S = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1) \quad \text{e} \quad \psi_A = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)$$

Essas funções de onda foram construídas a partir da consideração de que em uma molécula de Hidrogênio os dois átomos compartilham um par de elétrons provenientes de cada um dos átomos.

2.2.2.2.2 Sobreposição de Orbitais

Continuando com o tratamento mecânico-quântico da molécula de Hidrogênio, elevando as combinações lineares das funções de onda não perturbadas ao quadrado, multiplicando pela correção devido à perturbação (V) e integrando sobre

as coordenadas dos dois elétrons, surge uma expressão para a energia de interação entre os dois átomos de Hidrogênio (E), que depende da distância internuclear (R):

$$E(R) = \frac{\int V \psi_a^2(1) \psi_b^2(2) d\tau_1 d\tau_2 + \int V \psi_a^2(2) \psi_b^2(1) d\tau_1 d\tau_2 \pm 2 \int V \psi_a(1) \psi_b(1) \psi_a(2) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2}{\int \psi_a^2(1) \psi_b^2(2) + \psi_a^2(2) \psi_b^2(1) \pm 2 \psi_a(1) \psi_b(1) \psi_a(2) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2}$$

Considerando que a mudança de notação entre 1 e 2 não altera o produto das funções, pois os elétrons dos dois átomos são indistinguíveis, as duas primeiras integrais do numerador da equação acima são iguais. Dos dois primeiros termos do numerador surge a integral J e do terceiro termo aparece a integral K :

$$J = \int \left(+\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \psi_a^2(1) \psi_b^2(2) d\tau_1 d\tau_2$$

$$K = \int \left(+\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \psi_a(1) \psi_b(1) \psi_a(2) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2$$

Dessa forma, o numerador corresponde a $2J \pm 2K$. Assumindo que as funções dos átomos de Hidrogênio são normalizadas, o denominador torna-se $2 \pm 2S$. Onde:

$$S = \int \psi_a(1) \psi_b(1) \psi_a(2) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2$$

S é chamada de integral de superposição e corresponde à sobreposição entre as nuvens eletrônicas dos dois átomos de Hidrogênio, que ocorre na região internuclear. Segundo Pauling (1960, p. 108, tradução nossa), “espera-se que de dois orbitais em um átomo, o que puder se sobrepor mais com um orbital de outro átomo deverá formar a ligação mais forte”. A superposição corresponde à região coincidente na qual as funções de onda, que representam os orbitais, apresentam valores elevados. É importante destacar que para essa superposição ser construtiva, os orbitais devem ser estáveis e semipreenchidos. Nesse sentido, a força de uma

ligação covalente está relacionada com a medida da superposição entre os orbitais atômicos que participam da ligação.

2.2.2.2.3 Estabilidade e Emparelhamento de Spins

De acordo com as expressões do tópico anterior, a energia de interação $E(R)$ dos elétrons na molécula de Hidrogênio pode ser expressa da seguinte forma:

$$E(R)_S = \frac{J+K}{1+S} \quad \text{e} \quad E(R)_A = \frac{J-K}{1-S}$$

$E(R)_S$ corresponde à energia da função de onda simétrica, ou seja, a qual apresenta elétrons com spins antiparalelos. Por outro lado, $E(R)_A$ é a energia da função de onda antissimétrica, a qual apresenta elétrons com spins paralelos. Segundo Heitler (1956), em distâncias da magnitude do raio de Bohr, a função de onda simétrica proporciona ao sistema a energia mínima de interação. Nesse sentido, o estado da molécula correspondente à função de onda simétrica, no qual os elétrons apresentam spins antiparalelos ($\uparrow\downarrow$ ou $\downarrow\uparrow$) é mais estável do que o estado no qual os elétrons apresentam spins paralelos ($\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow$). Dessa forma, o aspecto energético determina que a ligação covalente seja formada entre átomos com elétrons de spins emparelhados, opostos.

Para avaliar a estabilidade do sistema, é necessário analisar as integrais J e K . J é a integral coulômbica e corresponde à parcela de energia relativa às interações eletrostáticas entre os dois átomos neutros de hidrogênio. Enquanto K é chamada de integral de troca ou de ressonância e corresponde à parcela de energia relativa à troca dos elétrons entre os orbitais dos dois átomos. Essa interpretação de K surge da explicação de Pauling em relação ao compartilhamento de elétrons sugerido por Lewis. Analisando a forma da integral de ressonância, Pauling (1960) interpretou que a magnitude da energia de ressonância aumenta proporcionalmente à superposição dos orbitais atômicos que formam a ligação química.

De acordo com Heitler (1956), em distâncias da magnitude do raio de Bohr, J é muito menor do que K , que é negativa. Nesse sentido, é K que determina se a energia de interação entre os átomos de Hidrogênio devido aos elétrons é positiva ou negativa. Na função de onda simétrica, com spins opostos, essa energia é negativa. Por outro lado, na função de onda antissimétrica, com spins paralelos, essa energia é positiva. Dessa forma, apenas a energia associada à função de onda simétrica estabiliza o sistema e permite a formação da ligação covalente.

A possibilidade da troca de elétrons entre os orbitais sobrepostos existe no âmbito do modelo, mas não pode ser comprovada experimentalmente. Heitler (1956) e outros cientistas rechaçam qualquer interpretação fenomênica de K , atribuindo tal energia a um efeito quântico. Porém, tanto Heitler (1956) quanto Pauling (1928a), admitem que a parcela de energia referente à K é a principal responsável pela formação da ligação covalente.

2.2.2.2.4 Direção e Alta Densidade Eletrônica Internuclear

Ao contrário dos outros tipos de ligação química, a ligação covalente é direcional, pois está orientada ao longo do eixo internuclear onde há alta densidade eletrônica. A hibridização de orbitais atômicos foi a solução proposta independentemente por Pauling (1931) e Slater (1931) para explicar a direcionalidade das ligações covalentes em moléculas complexas. A hibridização consiste na combinação linear das funções onda de orbitais atômicos para formar orbitais híbridos.

Para explicar a direção da ligação covalente de acordo com o modelo quântico, o átomo de Carbono será utilizado como exemplo. O átomo de Carbono tem na camada de valência quatro elétrons distribuídos nos orbitais $2s$ e $2p$. A configuração eletrônica $2s^2 2p^2$ não permite a formação de quatro ligações equivalentes, isso só ocorreria se a sua configuração eletrônica fosse $2s^1 2p^3$. A diferença de energia entre essas configurações é pequena ($\cong 96 \text{ kcal.mol}^{-1}$).

A formação de ligações covalentes libera energia e mais do que compensa, no caso do Carbono, a energia necessária para alterar a sua configuração eletrônica de $2s^2 2p^2$ para $2s^1 2p^3$, uma vez que são formadas quatro ligações covalentes. Dessa

forma, explica-se do ponto de vista energético a mudança de configuração eletrônica do Carbono para que ele forme quatro ligações covalentes equivalentes.

A configuração tetraédrica das quatro ligações covalentes simples formadas pelo Carbono resulta da combinação linear das funções de onda dos três orbitais p e da função de onda referente ao orbital s . Essa combinação resulta na formação de quatro orbitais híbridos do tipo sp^3 orientados em ângulos de $109^{\circ}28'$ entre si. Os orbitais híbridos sp^3 mantêm a direcionalidade dos orbitais p de origem e aumentam a região de superposição por meio da contribuição do orbital s , resultando em ligações mais fortes. Nesse sentido, os orbitais híbridos sp^3 apresentam $\frac{1}{4}$ das características do orbital s e $\frac{3}{4}$ das características dos orbitais p que lhe deram origem (PAULING, 1960). Além da hibridização sp^3 , o Carbono pode formar ainda orbitais híbridos do tipo sp^2 e sp . O exemplo do Carbono foi utilizado em função da sua importância para explicar a formação das substâncias orgânicas.

As ligações formadas a partir da superposição dos orbitais híbridos ou orbitais atômicos no eixo internuclear são denominadas ligações covalentes do tipo sigma (σ) ou ligações simples. Na hibridização sp^3 , o Carbono forma quatro ligações σ equivalentes. A simetria da ligação σ permite a rotação dos átomos ou grupos substituintes ao redor do eixo da ligação, quase que livremente, sem precisar de grande quantidade de energia (aproximadamente 3 Kcal/mol para a rotação entre os grupos substituintes na ligação covalente C–C em alguns alcanos simples).

A hibridização de orbitais atômicos também é utilizada para explicar a geometria de muitas outras moléculas, tais como: NH_3 e H_2O .

2.2.2.2.5 Multiplicidade

Diversos compostos são formados por meio de ligações múltiplas entre átomos do mesmo elemento químico ou de elementos químicos diferentes. O átomo de Carbono será utilizado novamente como exemplo, desta vez, para explicar a formação das ligações múltiplas (duplas e triplas).

Para formar ligações duplas, o átomo de Carbono deve estar hibridizado na forma sp^2 . A hibridização sp^2 do Carbono envolve a combinação linear entre um

orbital s e dois orbitais p para formar três orbitais híbridos do tipo sp^2 . Os orbitais híbridos sp^2 formam três ligações σ cujo ângulo é de 120° entre si, resultando numa estrutura trigonal plana. O orbital p do átomo de Carbono que não foi hibridizado mantém a sua forma de duplo haltere e se superpõe abaixo e acima do plano das ligações σ . Essas superposições laterais formam uma ligação mais fraca denominada ligação pi (π). Dessa forma, a ligação dupla ($C=C$) corresponde a uma ligação do tipo σ e outra do tipo π . (PAULING, 1960) No total, a hibridização sp^2 permite a formação de quatro ligações: três σ e uma π .

Quando hibridizado na forma sp , o Carbono combina dois orbitais: um s e um p para formar dois orbitais híbridos do tipo sp . Os orbitais híbridos sp formam duas ligações σ cujo ângulo é de 180° entre si, resultando numa estrutura linear. Os dois orbitais p que não foram hibridizados mantêm a sua forma de duplo haltere e se superpõem abaixo e acima do plano das ligações σ . Essas superposições laterais formam duas ligações π . Nesse sentido, a ligação tripla ($C\equiv C$) corresponde a uma ligação σ e duas ligações π . No total, a hibridização sp permite a formação de quatro ligações: duas σ e duas π . A hibridização sp também é observada nos átomos de Carbono que formam duas ligações duplas ($=C=$), nessa configuração, duas ligações são σ e duas ligações são π .

Além do átomo de Carbono, átomos de outros elementos químicos fazem de ligações múltiplas, tais como N, O, S e P. Nos livros didáticos de Química Orgânica utilizados no Ensino Superior, observa-se que o estudo da ligação covalente múltipla está voltado para explicação da formação das ligações duplas e triplas entre os átomos de Carbono, para isso, é empregada a TLV (BRUICE, 2006; SOLOMONS, FRYHLE, 2012).

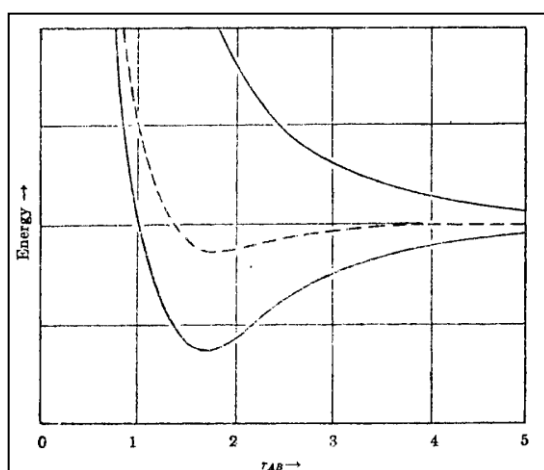
2.2.2.2.6 Comprimento, Energia de Ligação e Ressonância

De acordo com a IUPAC (2019), o comprimento de uma ligação covalente corresponde à distância internuclear de equilíbrio entre os átomos que participam a ligação. Quando os átomos que formam a ligação covalente estão separados exatamente pela distância internuclear de equilíbrio, a energia total do sistema chega ao mínimo, portanto, essa é a configuração mais estável. Para explicar as

relações entre comprimento de ligação, energia e ressonância será utilizada como exemplo a ligação H–H, da molécula do gás Hidrogênio (H_2).

O gráfico da Figura 3 refere-se à formação de uma molécula de gás Hidrogênio (H_2), a partir da interação entre dois átomos de Hidrogênio (H). A curva tracejada foi construída considerando apenas a interação eletrostática e sugere que, quando os dois átomos se aproximam, a energia do sistema aumenta devido às repulsões. Por outro lado, quando os dois átomos se afastam, a energia do sistema tende a zero. Portanto, se considerarmos apenas a interação eletrostática, não haverá a formação da molécula de Hidrogênio. No entanto, essa molécula existe e é estável.

Figura 3 - Gráfico energia de interação x distância internuclear da molécula de Hidrogênio.



Fonte: Pauling (1960, p. 24).

Se levarmos em consideração a ressonância do elétron entre os orbitais dos dois átomos de Hidrogênio ou, em outras palavras, a troca de orbital pelos dois elétrons compartilhados, a energia de interação entre os átomos diminui, conforme sugere a curva na parte inferior da Figura 3. Essa curva apresenta um ponto mínimo de energia quando a separação entre os átomos de Hidrogênio é de 0,79 Å. Dessa forma, a energia de ressonância provoca a diminuição da energia de interação entre os átomos e provoca a atração entre eles, de modo que ligação covalente na molécula Hidrogênio é estabelecida. O valor teórico do comprimento da ligação covalente H–H obtido teoricamente difere do valor calculado experimentalmente em apenas 0,05 Å (HAYNES, 2017).

A curva superior da Figura 3 representa outra possibilidade de interação entre dois átomos de Hidrogênio, porém não leva a formação de uma ligação covalente, pois em curtas distâncias a energia de interação entre os dois átomos é muita alta, tornando o sistema instável devido às repulsões. Em longas distâncias, a energia de interação os dois átomos tende a zero, portanto não haverá a formação da molécula de Hidrogênio.

A separação de 0,79 Å entre dois átomos de Hidrogênio leva o sistema ao nível mais estável, pois a energia de interação entre os elétrons é mínima devido à energia de ressonância.

Pode-se atribuir quatro estruturas de Lewis para a molécula de Hidrogênio:



Nas duas primeiras estruturas os elétrons são compartilhados igualmente entre os dois átomos de Hidrogênio, mas como eles são indistinguíveis, os elétrons 1 e 2 podem trocar de posição livremente entre os orbitais dos dois átomos (H_A e H_B). Essas duas estruturas são denominadas covalentes, pois são formadas por meio do compartilhamento igualitário de elétrons entre os dois átomos. Nas outras duas estruturas ocorre o compartilhamento desigual dos elétrons onde um dos átomos detém os dois elétrons. Essas duas estruturas são denominadas iônicas, pois são formadas por meio da transferência de elétrons entre os dois átomos.

As quatro estruturas de Lewis contribuem para o híbrido de ressonância, porém as estruturas covalentes são mais estáveis, e na distância internuclear de equilíbrio (0,79 Å), contribuem com aproximadamente 80% da energia da ligação H–H, que é 104,204 kcal.mol⁻¹ (LUO, 2007). As duas estruturas iônicas são instáveis e contribuem com apenas 5% da energia da ligação H–H. Os 15% restantes deve-se, entre outros efeitos, à polarização dos orbitais dos átomos de Hidrogênio (PAULING, 1960).

Portanto, segundo Pauling (1960), a energia de uma ligação covalente resulta quase que totalmente da energia de ressonância. Nesse sentido, quanto maior a possibilidade de ressonância dos elétrons, maior será a energia da ligação. Por sua

vez a ressonância dos elétrons depende da magnitude da superposição dos orbitais dos átomos que participam da ligação covalente. De acordo com os princípios da TLV, sem a superposição de orbitais não há possibilidade de formação da ligação covalente, pois os elétrons compartilhados não poderão entrar em ressonância.

2.2.2.2.7 Polaridade, Eletronegatividade e Caráter Parcial Iônico

Pauling (1932b; 1960), assim como Lewis (1916), propôs que a transição entre a ligação iônica e a ligação covalente era contínua. Ele defendia que todas as ligações covalentes apresentavam algum percentual de caráter iônico, assim como todas as ligações iônicas apresentavam algum percentual de caráter covalente. Pauling utilizou a teoria quântica e o conceito de eletronegatividade para justificar a transição contínua entre esses tipos de ligação química, seus argumentos serão discutidos a seguir.

A função de onda (ψ) que representa a ligação covalente simples A–A pode ser escrita da seguinte forma:

$$\psi_{A-A} = c_1\psi_{A:A} + c_2\psi_{A^+A^-} + c_3\psi_{A^-A^+}$$

Como se trata de uma molécula diatômica homonuclear, não há diferença de eletronegatividade entre os dois átomos. Portanto, essa ligação química tende a ser predominantemente covalente com baixo percentual iônico. Dessa forma, o coeficiente c_1 (estrutura covalente) é muito maior do que os coeficientes c_2 e c_3 (estruturas iônicas), que por sua vez são iguais.

No caso de uma ligação covalente diatômica heteronuclear A–B, a função de onda associada é:

$$\psi_{A-B} = c_1\psi_{A:B} + c_2\psi_{A^+B^-} + c_3\psi_{A^-B^+}$$

Nesse caso, as magnitudes dos coeficientes c_1 , c_2 e c_3 se modificam de acordo com a diferença de eletronegatividade entre A e B . Consequentemente a ligação $A-B$ pode ir gradualmente do extremo covalente ao extremo iônico. Considerando que B é mais eletronegativo do que A , a estrutura iônica na qual os elétrons compartilhados estão associados ao átomo mais eletronegativo (A^+B^-) é a mais estável. Nesse sentido, em termos qualitativos, a função de onda que representa a ligação $A-B$ é:

$$\psi_{A-B} = c_1\psi_{A:B} + c_2\psi_{A^+B^-}$$

Se a magnitude de c_1 for semelhante a de c_2 , a ligação química entre esses átomos pode ser considerada ressonante entre covalente e iônica. Nesse caso, ambas as estruturas contribuem igualmente para a formação da molécula AB . No entanto, a energia real da ligação $A-B$ é maior do que a energia de ligação da estrutura covalente ou da estrutura iônica, separadamente, porque a molécula é estabilizada pela energia de ressonância das duas estruturas. Se c_1 for maior do que c_2 , a ligação entre A e B apresentará maior caráter covalente. Por outro lado, se c_2 for maior do que c_1 , a ligação entre A e B apresentará maior caráter iônico. Em suma, o caráter iônico de uma ligação covalente está relacionado à proporção da contribuição de cada estrutura para a formação da molécula. Mesmo em moléculas diatômicas homonucleares, como a molécula de hidrogênio (H_2), a ligação covalente apresenta pequeno caráter iônico, pois o movimento eletrônico cria a polarização instantânea da molécula.

Segundo Pauling (1960), a eletronegatividade corresponde à capacidade de um átomo para atrair os elétrons para si em uma ligação química. A inserção da eletronegatividade no modelo quântico de ligação química desenvolvido por Pauling permitiu explicar não apenas a transição contínua entre as ligações iônicas e covalentes, mas também o caráter parcial iônico das ligações covalentes e o caráter parcial covalente das ligações iônicas. Provavelmente a classificação das ligações covalentes em polares e apolares derivou da proposição do caráter parcial iônico das ligações covalentes proposto por Pauling.

2.3 UM SISTEMA CONCEITUAL PARA O CONCEITO DE LIGAÇÃO COVALENTE

O modelo quântico da ligação covalente incorpora as características clássicas e as explica de outra maneira. Essas características formam um sistema conceitual no qual podem ser estabelecidas diversas relações. A partir da analogia feita por Vigotski (2009) entre o sistema conceitual e o sistema de coordenadas geográficas BELLAS; GONZALEZ e SILVA (2015) propõem a construção de mapas conceituais na perspectiva da teoria histórico-cultural.

Neste estudo foi construído um mapa conceitual referente ao conceito de ligação covalente (Figura 4). Nesse mapa conceitual são apresentadas algumas relações entre as características (do modelo clássico e do modelo quântico) que compõem o sistema conceitual no qual o conceito de ligação covalente está inserido.

Na analogia das coordenadas geográficas do globo terrestre utilizada por Vigotski (2009), os conceitos apresentam latitude e longitude. A latitude corresponde a posição do conceito em relação ao pensamento abstrato (acima) e o pensamento concreto (abaixo). Os conceitos científicos são abstratos por natureza e, segundo a analogia de Vigotski, deveriam se situar na parte superior do mapa conceitual. Por outro lado, os conceitos menos abstratos e cotidianos, tendem a se situar na parte inferior do mapa conceitual. A longitude refere-se ao grau de generalização dos conceitos, em um mapa conceitual, os conceitos mais gerais, ou seja, mais amplos e que podem expressar uma classe de objetos se situam mais à esquerda do que os conceitos que apresentar menor grau de generalização

Na construção do mapa conceitual referente ao conceito de ligação covalente (Figura 4), sempre que possível, os conceitos mais abstratos foram posicionados na parte superior: sobreposição de orbitais, emparelhamento de spins, direção da ligação. Contrariamente, os conceitos menos abstratos, sempre que possível, foram posicionados mais abaixo, por exemplo: polaridade, comprimento de ligação, energia e alta densidade eletrônica internuclear. Essas características apresentam certo grau de empirismo, pois podem ser medidas experimentalmente.

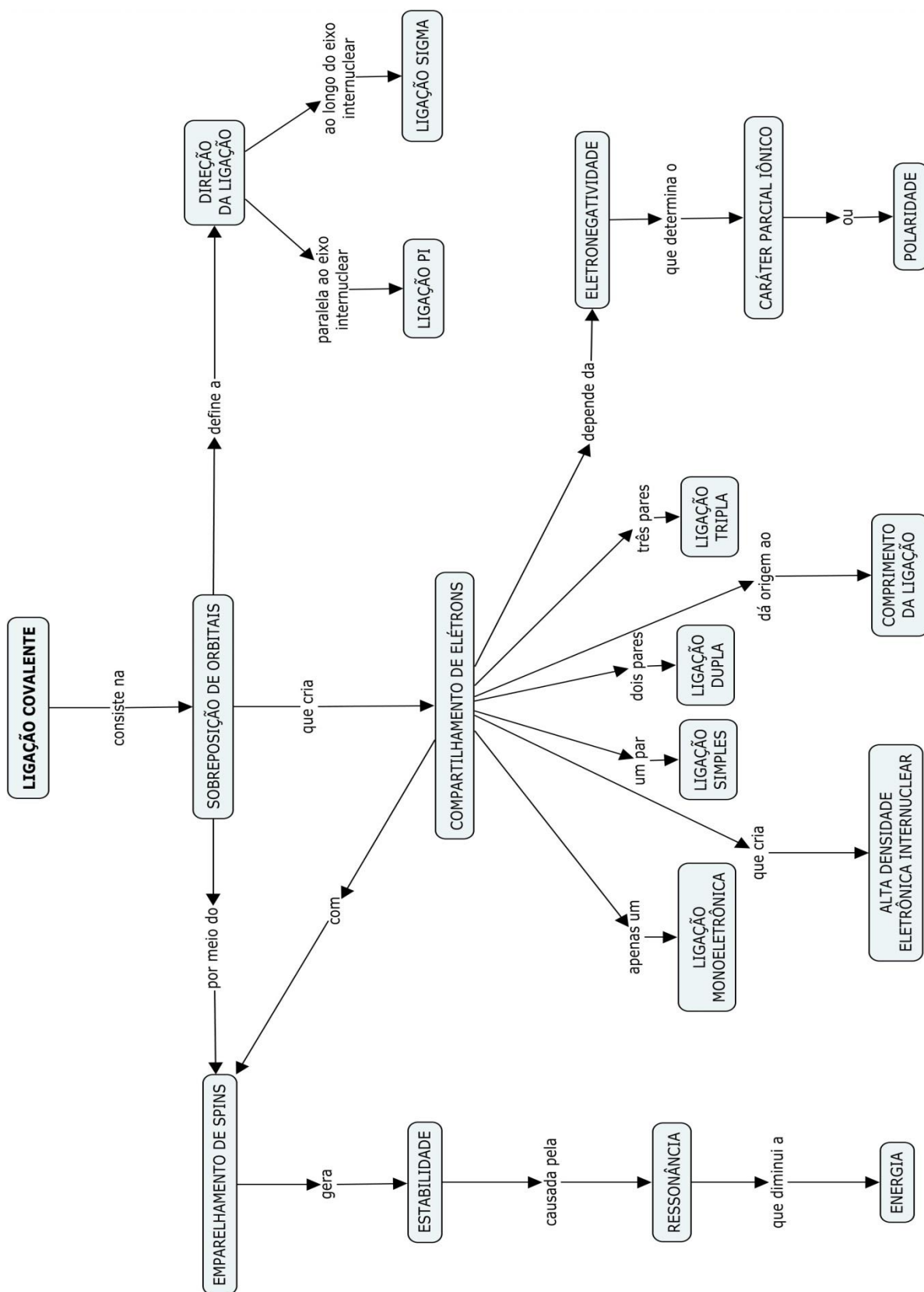
Em relação ao grau de generalidade, sempre que possível, os conceitos mais gerais foram posicionados no mapa conceitual (Figura 4) acima dos mais específicos. Por exemplo, as ligações covalentes monoelétrica, simples, dupla e

tripla, foram posicionadas no mesmo nível, mas abaixo do compartilhamento de elétrons, que é um conceito mais geral.

Devido à complexidade dos conceitos envolvidos e das limitações gráficas que a construção de um mapa conceitual impõe, tornou-se inviável ordenar todos os conceitos de acordo com graus de abstração e de generalidade. Além disso, seria necessário dispor de estudos aprofundados de todos os conceitos envolvidos para verificar e comparar os parâmetros de abstração e generalidade. Dessa forma, a construção do mapa privilegiou as relações entre os conceitos de acordo com os modelos de ligação covalente clássico e quântico.

Observando o mapa conceitual construído pode-se perceber que o conceito de ligação covalente é tipicamente um conceito científico, na acepção de Vigotski (2009), pois faz parte de um rico e complexo sistema conceitual. Esse mapa conceitual apresenta uma das formas possíveis de relacionar as características que compõem o sistema conceitual da ligação covalente. É possível construir outros mapas conceituais desse conceito contendo mais, menos, ou até mesmo outras características. No entanto, o mapa conceitual construído abrange a maior parte do modelo clássico e do modelo quântico da ligação covalente, discutidos anteriormente.

Figura 4 – Mapa conceitual do conceito de ligação covalente.



Fonte: Própria

3. METODOLOGIA

Neste capítulo serão apresentados os procedimentos metodológicos que guiaram a coleta e a análise dos dados. Este capítulo está dividido em cinco tópicos: 3.1 Método de Pesquisa, 3.2 Tipo de Pesquisa, 3.3 Sujeitos e Ambiente de Pesquisa, 3.4 Coleta de Dados e 3.5 Análise de Dados.

3.1 MÉTODO E TIPO DE PESQUISA

Este estudo apresenta elementos do método qualitativo de pesquisa, tendo em vista que, possui algumas das características da investigação qualitativa identificadas por Bogdan e Biklen (1994):

1. *O ambiente natural como fonte de dados e o pesquisador como instrumento principal:* neste estudo, uma parte dos dados coletados (questionário) foi coletada no ambiente da universidade na disciplina Monografia. Além disso, todos os dados (questionários e entrevistas) foram coletados diretamente pelo pesquisador.
2. *A investigação qualitativa é descritiva:* esta pesquisa fez uso de dados textuais, falas transcritas e imagens coletadas das respostas dos sujeitos de pesquisa. Todo esse material foi analisado de forma descritiva.
3. *A importância do significado:* este estudo buscou respeitar o significado dado pelos sujeitos em suas respostas ao questionário e à entrevista.

O método qualitativo de pesquisa foi empregado neste estudo em função de sua adequação ao objeto de estudo, que é a conceituação da ligação covalente por parte de licenciandos em Química. De acordo com Yin (2008), a pesquisa qualitativa permite a realização de estudos aprofundados sobre uma ampla gama de temas. Essa característica do método qualitativo o torna ideal e adequado aos estudos da área de ensino, sobretudo os que enfocam a formação de conceitos sob os mais diversos aportes teóricos.

Este estudo pode ser considerado uma pesquisa explicativa que utilizou a descrição e a interpretação para analisar os dados (YIN, 2016). As investigações explicativas buscam esclarecer os fenômenos quanto a sua origem e

desenvolvimento subsequente, sempre que possível estabelecendo relações causais que visam explicá-los.

De acordo com Gil (2002, p. 42):

Essas pesquisas têm como preocupação central identificar os fatores que determinam ou que contribuem para a ocorrência dos fenômenos. Esse é o tipo de pesquisa que mais aprofunda o conhecimento da realidade, porque explica a razão, o porquê das coisas. Por isso mesmo, é o tipo mais complexo e delicado, já que o risco de cometer erros aumenta consideravelmente.

A presente pesquisa teve como objetivo analisar o conceito de ligação covalente explicitado por um grupo de licenciandos em Química. A análise dos dados obtidos envolveu a explicação dos mesmos, para isso, foram inseridas inferências e comparações com outras pesquisas sobre o mesmo conceito.

3.2 SUJEITOS E AMBIENTE DE PESQUISA

Esta pesquisa envolveu treze (13) licenciandos em Química de uma Instituição Federal de Ensino Superior (IFES) do estado de Pernambuco (PE). Esses sujeitos de pesquisa cursavam a disciplina Monografia, componente curricular do último semestre do curso de Licenciatura em Química, nos períodos vespertino (04) e noturno (09). Foram escolhidos por já estarem cursando o último período do curso de Licenciatura em Química, a essa altura eles já estudaram o conceito de ligação covalente ao longo de várias disciplinas nas perspectivas clássica e quântica.

Por questões éticas, os sujeitos de pesquisa não serão identificados neste estudo. Dessa forma, cada um recebeu um código de identificação composto por dois caracteres: E1, E2, E3... O primeiro caractere (E) refere-se ao fato de que, no momento da pesquisa, eles eram estudantes, enquanto que o segundo (1, 2, 3...) é apenas uma numeração progressiva atribuída aleatoriamente a cada sujeito.

3.3 COLETA DE DADOS

Antes da coleta de dados, todos os sujeitos leram e assinaram o termo de consentimento livre e esclarecido (Apêndice A).

Foram utilizados dois instrumentos para a coleta de dados: questionário e entrevista semiestruturada. Inicialmente os estudantes responderam um questionário sobre o conceito de ligação química e de ligação covalente. O uso do questionário se deu em função da sua capacidade de coletar informações de uma amostra maior de sujeitos a fim de categorizá-las e aprofundá-las posteriormente. Antes de ser aplicado, o questionário foi validado por três professores da área de Ensino de Química e por um grupo de estudantes de Licenciatura em Química. A aplicação do questionário ocorreu no horário da aula da disciplina Monografia (vespertino e noturno), foi fixado o tempo de duas horas-aula (100 min) para a entrega dos questionários respondidos ao pesquisador¹². O questionário foi composto por dez (10) questões, distribuídas em dez páginas, de forma que, o licenciando tinha a sua disposição uma folha inteira para inserir suas respostas. As perguntas do questionário constam no Quadro 1.

O objetivo das cinco primeiras questões foi identificar definições e características do conceito de ligação covalente. As demais questões tratam de características que compõem o sistema conceitual de ligação covalente. Nesse sentido, os dados obtidos por meio do questionário permitiram a categorização dos sujeitos de pesquisa para a próxima fase de coleta de dados: a realização de entrevistas semiestruturadas.

O uso da entrevista semiestruturada neste estudo se deu em função do seu potencial imediato para extrair e aprofundar informações fornecidas diretamente dos sujeitos (YIN, 2016). A análise textual das respostas do questionário permitiu a categorização dos sujeitos de pesquisa em três grupos: 1- sujeitos que abordavam a ligação covalente por meio do modelo clássico (E2, E3, E4, E5, E8, E12, E13); 2- sujeitos que abordavam a ligação covalente por meio do modelo quântico (E1); 3-

¹² 100 minutos foram suficientes, tendo em vista que, todos os estudantes entregaram o questionário respondido antes do tempo estipulado.

sujeitos que abordavam a ligação covalente por meio do modelo híbrido (clássico e quântico) (E6, E7, E9, E10, E11).

Quadro 1 – Perguntas do questionário sobre ligação química e ligação covalente.

QUESTÕES
1. Se você tivesse que explicar o que é uma ligação química para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
2. Se você tivesse que explicar o que é uma ligação covalente para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
3. Se você tivesse que explicar como se forma uma ligação covalente para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
4. Explique, detalhadamente, a ligação química na molécula de H ₂ .
5. Se você tivesse que explicar a participação dos elétrons numa ligação covalente entre dois átomos para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
6. Se você tivesse que explicar a energia envolvida na formação/quebra de uma ligação covalente para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
7. Se você tivesse que explicar a ressonância de uma ligação covalente para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
8. Se você tivesse que explicar a direção de uma ligação covalente para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
9. Se você tivesse que explicar o comprimento de uma ligação covalente para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça um exemplo que ajude a esclarecer sua explicação.
10. Se você tivesse que explicar as ligações covalentes simples, duplas e triplas formadas pelo Carbono para alguém que não soubesse o assunto, o que diria? Forneça exemplos que ajudem a esclarecer sua explicação.

Fonte: Própria.

Foram selecionados para a entrevista semiestruturada sujeitos de pesquisa pertencentes aos três grupos: dois do grupo 1 (E2 e E8), dois do grupo 2 (E6 e E7) e um do grupo 3 (E1). Além do critério do grupo (modelo clássico, quântico ou híbrido), os estudantes foram selecionados para a entrevista de acordo com a sua disponibilidade e de seu desempenho nos questionários. Dessa forma, não foram incluídos nessa etapa da coleta de dados aqueles estudantes que deixaram muitas questões em branco no questionário, os que forneceram respostas pouco elucidativas e os que não estavam disponíveis para a realização das entrevistas. Dentre os sujeitos entrevistados, apenas E7 nunca ensinou Química.

A realização da entrevista semiestruturada teve duas finalidades: 1)- aprofundar e discutir os dados obtidos por meio do questionário; 2)- analisar como os licenciandos mobilizam seus conhecimentos na resolução de problemas que envolvem ligações covalentes específicas. A prática das entrevistas levou em consideração as seguintes orientações sugeridas por Lüdke e André (2014):

- Respeitar o entrevistado;
- Respeitar as informações fornecidas;
- Utilizar vocabulário adequado ao nível de instrução do entrevistado;
- Estimular o fluxo natural de informações por parte do entrevistado;
- Ouvir com atenção as respostas;
- Não influenciar as respostas do entrevistado;
- Gerar um clima de confiança durante todo o tempo da entrevista;

As entrevistas semiestruturadas foram registradas por meio de um dispositivo eletrônico de gravação de áudio. Em seguida, foi realizada a transcrição manual das gravações, que tiveram uma média de 45 minutos. Ao longo da entrevista outras perguntas foram formuladas. Isso ocorreu sempre que o pesquisador percebeu respostas imprecisas ou incompletas. O roteiro básico das entrevistas e objetivo das perguntas encontram-se no Quadro 9 (Apêndice B).

Ao final da entrevista, os sujeitos de pesquisa responderam três problemas sobre ligações covalentes específicas que se encontram no Quadro 2, a seguir:

Quadro 2 – Problemas propostos após a entrevista.

1. Explique em detalhes a formação da molécula de gás nitrogênio (N_2) a partir de dois átomos de nitrogênio (N).

2. Como você explica os dados da tabela a seguir:

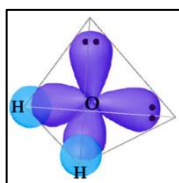
Tabela 1 - Energia e comprimento de ligação dos ácidos halogenídricos.

Ligação	Energia de Ligação	Comprimento
H-F	136 kJ/mol	0.91 Å
H-Cl	103 kJ/mol	1.27 Å
H-Br	87 kJ/mol	1.41 Å
H-I	71 KJ/mol	1.60 Å

Fonte: Própria.

3. Explique a figura a seguir a partir dos seus conhecimentos sobre ligação química.

Figura 1 - Estrutura de uma molécula de água.



Fonte: Própria.

No Quadro 3 encontram-se os objetivos relativos a cada questão proposta:

Quadro 3 - Objetivos dos problemas propostos.

PROBLEMA	OBJETIVOS
1	Aprofundar os dados obtidos por meio do questionário, fazendo com que o sujeito aplicasse seus conhecimentos a um caso específico de ligação covalente, nesse caso, a ligação covalente entre dois átomos de nitrogênio. A ligação covalente $N \equiv N$ foi escolhida em função da sua complexidade e porque o gás nitrogênio é comum e sua molécula é bastante utilizada como exemplo nas aulas e nos livros didáticos.
2	Aprofundar os dados obtidos por meio do questionário fazendo com que o sujeito aplicasse seus conhecimentos sobre energia de ligação e comprimento de ligação a ligações covalentes específicas, nesse caso, as ligações covalentes das moléculas dos ácidos halogenídricos. Essa questão foi escolhida em função do tipo de resposta que pode ser obtida, pois o sujeito poderia respondê-la utilizando a abordagem clássica e/ou quântica.
3	Aprofundar os dados obtidos por meio do questionário fazendo com que o sujeito aplicasse seus conhecimentos sobre ligação covalente numa perspectiva quântica a ligações covalentes específicas, nesse caso, as ligações covalentes da molécula de água.

Fonte: Própria.

Após a coleta de dados foi realizada uma análise da literatura de ensino de química sobre o conceito de ligação covalente em periódicos nacionais e internacionais da área de Ensino de Química e em bancos digitais de dissertações e teses nacionais.

Foram buscados artigos científicos sobre o ensino e a aprendizagem do conceito de ligação covalente em periódicos nacionais e internacionais da área de Ensino de Química. Para fins de pesquisa, foram utilizadas as seguintes palavras-chave: ligação química; ligações químicas; ligação covalente; ligações covalentes; ligação iônica; ligações iônicas; ligação metálica; ligações metálicas. Também foram empregadas as traduções dessas palavras-chave em língua inglesa e espanhola. Só foram coletados artigos publicados nos últimos dez anos (2010-2019). A pesquisa foi

realizada nas bases de dados: Educational Resources Information Center (ERIC) e Scientific Electronic Library Online (SciELO).

Além das bases de dados, foram pesquisados artigos em periódicos nacionais e internacionais pertencentes aos estratos A1, A2, B1 e B2 do Qualis (sistema nacional de avaliação de periódicos) da CAPES. Dessa forma, foram pesquisados artigos nos seguintes periódicos: Química Nova; Ensaio: Pesquisa em Educação em Ciências; Ciência & Educação; Amazônia – Revista de Educação em Ciências e Matemáticas; Investigações em Ensino de Ciências; Revista de Ensino de Ciências e Matemática; Revista Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia; Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências; Revista de Educação, Ciências e Matemática; Experiências em Ensino de Ciências; Revista Brasileira de Ensino de Química; Química Nova na Escola; Educación Química; Enseñanza de las Ciencias; Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias e Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias.

As dissertações e teses foram coletadas diretamente nos sites do Catálogo de Teses e Dissertações da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e da Biblioteca Digital Brasileira de Teses e Dissertações (BDTD). Os termos inseridos nas barras de pesquisas desses sites foram: “ligação química”, “ligações químicas”, “ligação covalente”, “ligações covalentes”, “ligação iônica”, “ligações iônicas”, “ligação metálica” e “ligações metálicas”. O único filtro de pesquisa estabelecido foi o período de publicação, de 2009 a 2019.

3.4 ANÁLISE DE DADOS

A análise da literatura de ensino de química em relação ao conceito de ligação covalente serviu de parâmetro para discutir o sistema conceitual expresso pelos sujeitos de pesquisa por meio do questionário e das entrevistas.

As respostas do questionário e das entrevistas foram analisadas buscando identificar as características do conceito de ligação covalente citadas pelos estudantes. Para tanto, procuramos localizar nos textos dos estudantes os termos conceituais relativos às características ou expressões sinônimas ou, mesmo, expressões que os lembrassem, assim como seus conceitos e relações conceituais.

Além disso, em função dos significados encontrados, as respostas dos estudantes foram classificadas de acordo com as seguintes categorias: modelo clássico, modelo quântico, modelo híbrido (clássico e quântico), outras respostas e não respondeu.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, serão analisadas e discutidas, inicialmente, as abordagens do conceito de ligação covalente presentes na literatura de Ensino de Química em seguida serão analisados e discutidos os dados coletados por meio do questionário e das entrevistas.

4.1 ANÁLISE DA LITERATURA DE ENSINO DE QUÍMICA

Foram identificados, coletados e analisados cinquenta e dois (52) artigos científicos, dos quais, sete (07) em periódicos nacionais e quarenta e cinco (45) em periódicos internacionais. Também foram identificadas, coletadas e analisadas quatro (4) teses e vinte e três (23) dissertações.

4.1.1 Análise de Artigos Científicos

Em relação ao modelo (clássico, quântico ou híbrido), trinta e nove (39) artigos apresentam apenas o modelo clássico da ligação covalente (ALMEIDA; AYALA; QUADROS, 2018; AWAN; KHAN, 2013; BERGQVIST; DRECHSLER; RUNDGREN 2016; BURROWS; MOORING, 2015; CASTRO; PADILLA, 2017; CROFT, 2014; CRUJEIRAS-PÉREZ, 2017; ERMAN, 2017; EYMUR; GEBAN, 2017; FERNANDES; CAMPOS, 2013; FERNANDES; CAMPOS; 2014; FERNANDES; CAMPOS; MARCELINO-JR, 2010; FRANCO-MARISCAL; MARTÍNEZ, 2017; FREITAS FILHO *et al.*, 2017; GONZÁLEZ-FELIPE *et al.*, 2017; GONZÁLEZ-FELIPE *et al.*, 2019; HILTON; NICHOLS, 2011; JOKI *et al.*, 2015; LAZO; ZÚÑIGA, 2013; LIMA; ARENA; PASSOS, 2018; LUXFORD; BRETZ, 2013; LUXFORD; BRETZ, 2014; PAPPÁ; TSARPALIS, 2011; PATRON *et al.*, 2017; PRODJOSANTOSO; HERTINA; IRWANTO, 2019; ROMPAYOM; TAMBUNCHONG; DECHSRI, 2011; SCHULTZE; NILSSON, 2018; SENDUR, 2014; SIBANDA; HOBDEN, 2015; SILVA; CAMPOS, 2018; TEMEL; OZCAN, 2016; TRINDADE; HARTWIG, 2012; TSARPALIS; PAPPÁ;

BYERS, 2018; TURNER, 2016; UCE, 2015; UCE; CEYHAN, 2019; VENKATARAMAN, 2017; VRABEC; PROKSA, 2016; WANG; BARROW, 2013).

Esses artigos assumem o modelo clássico no qual a ligação covalente é formada por meio do compartilhamento e que os átomos se mantêm unidos por forças eletrostáticas entre núcleos e elétrons. Essa abordagem é mais difundida no Ensino Médio em função da sua simplicidade. No Ensino Superior essa abordagem é ampliada por meio da incorporação do modelo quântico.

Onze (11) artigos apresentam modelos híbridos formados por características dos modelos clássico e quântico (BERGQVIST; RUNDGREN, 2017; BERGQVIST *et al.*, 2013; COSTU; NIAZ, 2012; DHINDSA; TREAGUST, 2014; KARACOP; DOYMUS, 2013; JOKI; AKSELA, 2018; LIMA *et al.*, 2017; MATUS; BENARROCH; NAPPA, 2011; NAHUM *et al.*, 2010; NIMMERMARK *et al.*, 2016; YAYON; MAMLOK-NAAMAN; FORTUS, 2012). Esses artigos mesclam as abordagens clássica e quântica frequentemente sem discutir quais são as características clássicas e quânticas que envolvem o conceito de ligação covalente. É importante que o estudante saiba distinguir esses dois tipos de características, pois a mistura de modelos de ligação clássicos e quânticos pode resultar em dificuldades de aprendizagem e no surgimento de concepções alternativas.

Apenas dois (02) artigos apresentam apenas a abordagem quântica (DICKS, 2011; SALAH; DUMON, 2014). Esses estudos abordam a ligação covalente por meio da Teoria da Ligação de Valência (TLV) e da Teoria dos orbitais Moleculares (TOM). Na abordagem quântica, o conceito de ligação covalente é explicado por meio da sobreposição de orbitais, do emparelhamento de spins opostos e da energia de ressonância. Essas características requerem uma compreensão profunda da estrutura atômica e de alguns princípios da teoria quântica.

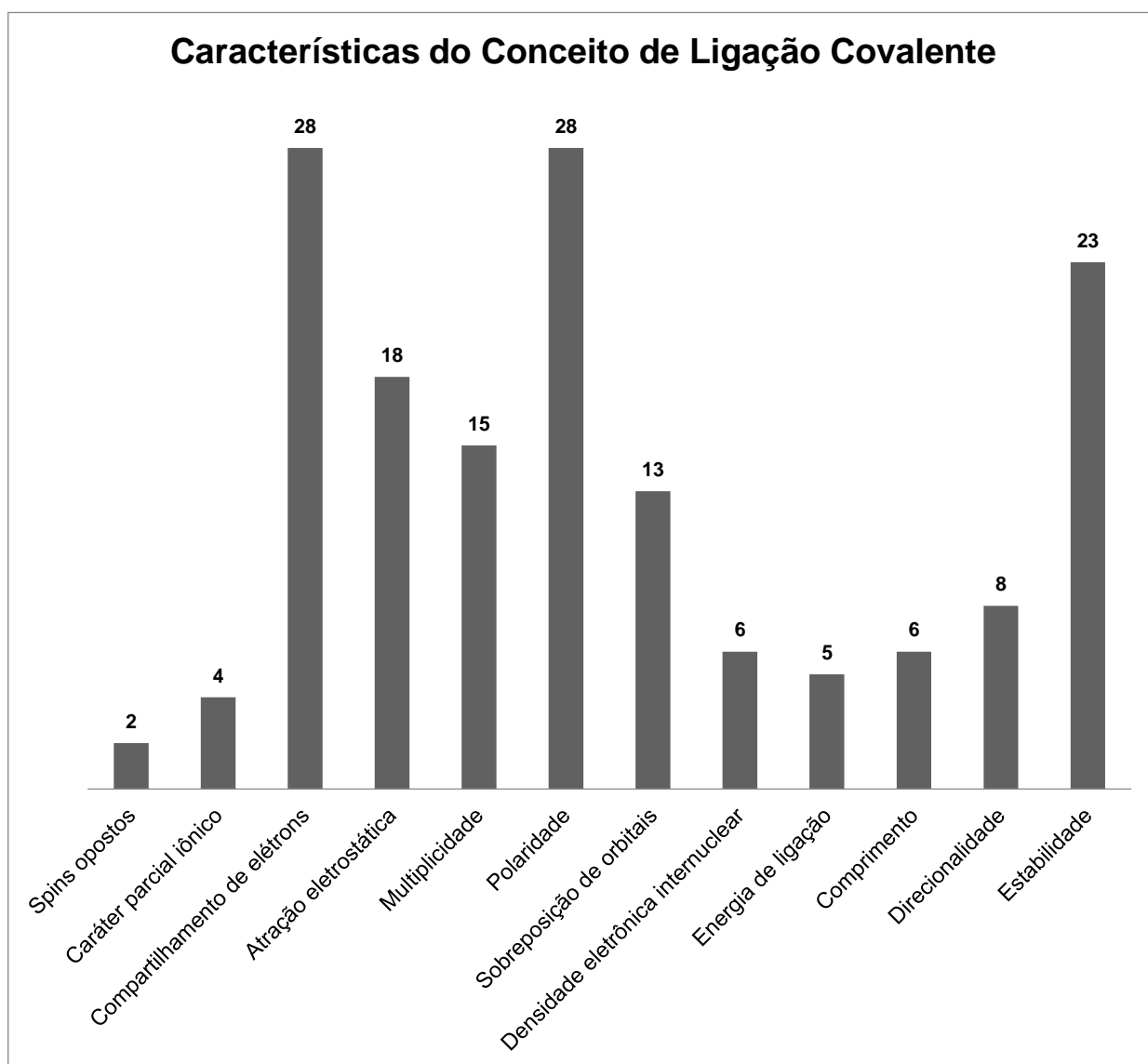
Durante a análise, observou-se que poucos artigos (apenas cinco) apresentaram uma definição clara do conceito de ligação covalente. Segundo Lima *et al.*, (2017, p. 68):

A ligação covalente é um tipo de ligação química caracterizada pelo compartilhamento de um ou mais pares de elétrons entre átomos, causando uma atração mútua entre eles, que mantêm a molécula resultante unida.

Essa definição apresenta duas características da abordagem clássica do conceito de ligação covalente: 1)- compartilhamento de pares eletrônicos; 2)- atração eletrostática. Nenhuma das definições localizadas nos estudos analisados apresenta características da abordagem quântica do conceito de ligação covalente. Esse dado evidencia a ausência da ênfase na abordagem quântica tanto em artigos científicos nacionais quanto internacionais.

A Figura 5, a seguir, apresenta a frequência das características referentes ao conceito de ligação covalente identificadas a partir da análise dos artigos científicos:

Figura 5 – Características da ligação covalente em artigos científicos.



Fonte: Própria.

Apareceram nos artigos científicos doze características relativas ao conceito de ligação covalente. De acordo com o gráfico anterior, compartilhamento de pares eletrônicos e polaridade foram as características da ligação covalente que mais apareceram nos artigos científicos analisados. Em relação ao compartilhamento de elétrons, observa-se que essa é a principal característica enfatizada no ensino da ligação covalente.

No entanto, é necessário esclarecer o que se entende por compartilhamento no contexto da ligação química, pois esse termo apresenta outro significado no cotidiano. Quanto à polaridade, essa característica tem sido usada frequentemente para classificar as ligações covalentes em polares e apolares, no entanto, poderia ser mais bem aproveitada para demonstrar a transição contínua entre a ligação covalente e a iônica (BURROWS; MOORING, 2015).

A estabilidade apareceu vinte e três vezes por meio de duas explicações distintas: regra do octeto (onze vezes) e diminuição da energia do sistema (doze vezes). O uso da regra do octeto é cada vez mais criticado no ensino pelo potencial para a geração de concepções alternativas. Cada vez mais é recomendada a explicação da formação das ligações químicas por meio da diminuição da energia total do sistema (JOKI *et al.*, 2015; NAHUM *et al.*, 2010; VENKATARAMAN, 2017).

A atração eletrostática entre núcleos e elétrons apareceu dezoito vezes (18), sendo a principal explicação para justificar a formação das ligações covalentes. No entanto, a explicação mais adequada da formação da ligação covalente envolve a contribuição principal da energia de ressonância que provoca a diminuição da energia total do sistema (PAULING, 1960). A atração eletrostática envolve um modelo mais simples para explicar a ligação covalente e está alinhada aos conteúdos do Ensino Médio, porém no Ensino Superior é necessário demonstrar que a contribuição eletrostática é bem menor do que a da energia de ressonância.

Das características do modelo quântico, a sobreposição de orbitais apareceu treze (13) vezes, enquanto que o emparelhamento de spins duas (02) vezes. Isso se deve, pelo menos em parte, ao predomínio da abordagem clássica nos estudos analisados. Isso pode ser explicado se considerarmos que as características do modelo quântico da ligação covalente são ensinadas no nível superior e a maioria dos artigos analisados tem foco no Ensino Médio (FREITAS FILHO *et al.*, 2017; LIMA *et al.*, 2017; SILVA; CAMPOS, 2018).

A análise dos artigos científicos revelou uma diversidade de abordagens em relação ao conceito de ligação química / ligação covalente. No entanto, existem poucos estudos que abordam a ligação covalente detalhadamente, nenhum estudo enfatiza exclusivamente as características desse conceito. Em termos nacionais, nenhum artigo científico aborda a ligação covalente em detalhe, esse conceito aparece apenas de forma discreta em estudos sobre ligações químicas de forma geral. Em resumo, os dados analisados apontam para a necessidade de mais estudos voltados exclusivamente para o ensino do conceito de ligação covalente.

4.1.2 Análise das Dissertações e Teses

Foram identificados vinte e sete (27) estudos, sendo quatro teses e vinte e três dissertações. A maioria das teses e dissertações (19) aborda a ligação covalente de acordo o modelo clássico (ESPANHOL, 2017; FABRI, 2016; FONSECA, 2016; GUIMARÃES, 2009; KORDIAK, 2017; KOSCIANSKI, 2013; LIMA, 2016; MEDEIROS, 2014; MENDONÇA, 2011; PARIZ, 2011; PAZINATO, 2016; RABER, 2015; SCALCO, 2014; SILVA, 2017; SILVEIRA JÚNIOR, 2012; SOUSA, 2015; TORRES, 2017; TRINDADE, 2011; TRUJILLO, 2017). Apenas três (03) pesquisas abordam a ligação covalente segundo o modelo quântico (CLEMENTE, 2013; MENDONÇA, 2014; SILVA, 2016). Cinco (05) estudos abordam a ligação química simultaneamente de forma clássica e quântica (modelo híbrido) (BARRETO, 2016; LEITE, 2011; MARQUES, 2015; SILVA, 2010; SILVEIRA JÚNIOR, 2015). Essas abordagens são empregadas de acordo com nível de ensino.

No ensino das ligações químicas é comum a mistura indiscriminada dessas abordagens, o que acarreta em uma série de problemas para a aprendizagem.

Para Toma:

A escolha do modelo no ensino de ligações químicas deve ser compatível com o modelo atômico adotado, conforme destacado por Chassot (1996), e ao mesmo tempo, adequar-se aos objetivos de ensino-aprendizagem, fornecendo a base necessária para o desenvolvimento cognitivo do aluno. (TOMA, 1999, p. 8)

A mistura indiscriminada dos modelos clássico e quântico na abordagem das ligações químicas foi observada em algumas das teses e dissertações analisadas.

No trecho a seguir, Leite (2011, p. 116) usa uma definição que cita a superposição de orbitais ao mesmo tempo em que explica a formação da ligação covalente apenas em termos eletrostáticos:

À medida que os orbitais se superpõem, a densidade eletrônica é concentrada entre os núcleos, uma vez que os elétrons nas regiões de superposição são simultaneamente atraídos por ambos os núcleos, ele mantém os átomos unidos formando uma ligação covalente.

A maior parte das dissertações e teses analisadas é dirigida para o Ensino Médio, isso explica o grande número de estudos (19) que abordam a ligação química segundo o modelo clássico. A teoria quântica foi assumida por apenas três pesquisas que se basearam na Teoria da Ligação de Valência (TLV) para descrever a ligação covalente, enfatizando a sobreposição de orbitais. A Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM), quando foi citada, não forneceu nenhuma característica exclusiva da ligação covalente.

Em relação ao conceito de ligação covalente, nas dissertações e teses predomina o modelo clássico. Por exemplo, na pesquisa de Scalco (2014, p. 86) foi identificado o seguinte conceito:

Compartilhamento de dois elétrons sendo um de cada átomo, e assim estes assumem estrutura eletrônica de gás nobre. Pensando que esse par de elétrons compartilhados interage com os dois núcleos, pode-se dizer que nenhum átomo perde totalmente um elétron.

Esse conceito pode ser decomposto nas seguintes características clássicas: (1)- compartilhamento de um par eletrônico; (2)- estabilidade conferida pela regra do octeto; (3)- atração eletrostática entre núcleos e elétrons.

Outros trabalhos (FABRI, 2016; KOSCIANSKI, 2013) sequer forneceram algum conceito ou característica da ligação covalente.

Em relação ao conceito quântico de ligação covalente, encontra-se a seguir o utilizado por Silva (2016, p. 39):

Acontecerá com a sobreposição dos orbitais atômicos do átomo aumentando a densidade eletrônica entre os núcleos e isso acarretará em um aumento de forças atrativas diminuindo a energia do composto formado.

Esse conceito pode ser decomposto em: (1)- sobreposição de orbitais atômicos; (2)- densidade eletrônica elevada na região internuclear; (3)- estabilização pela diminuição da energia do sistema.

Em relação aos estudos que abordam a perspectiva clássica das ligações químicas, observa-se que a ligação covalente é descrita dando ênfase ao compartilhamento de elétrons entre os átomos. Essa foi a característica da ligação covalente mais citada nas teses e dissertações (figura 6). Talvez isso seja o reflexo do ensino que, frequentemente, usa o conceito de compartilhamento de elétrons apenas para diferenciar a ligação covalente da ligação iônica, que se forma por meio da transferência de elétrons.

De acordo com Boo (2000), muitos livros estabelecem explicitamente que 'uma ligação covalente é o par de elétrons compartilhados em uma molécula covalente'. Esse autor considera essa afirmação uma concepção alternativa (concepção que está em desacordo com o que é aceito atualmente pela comunidade científica), porque, numa perspectiva clássica, a ligação covalente corresponde à força atrativa resultante da interação eletrostática entre núcleos e elétrons.

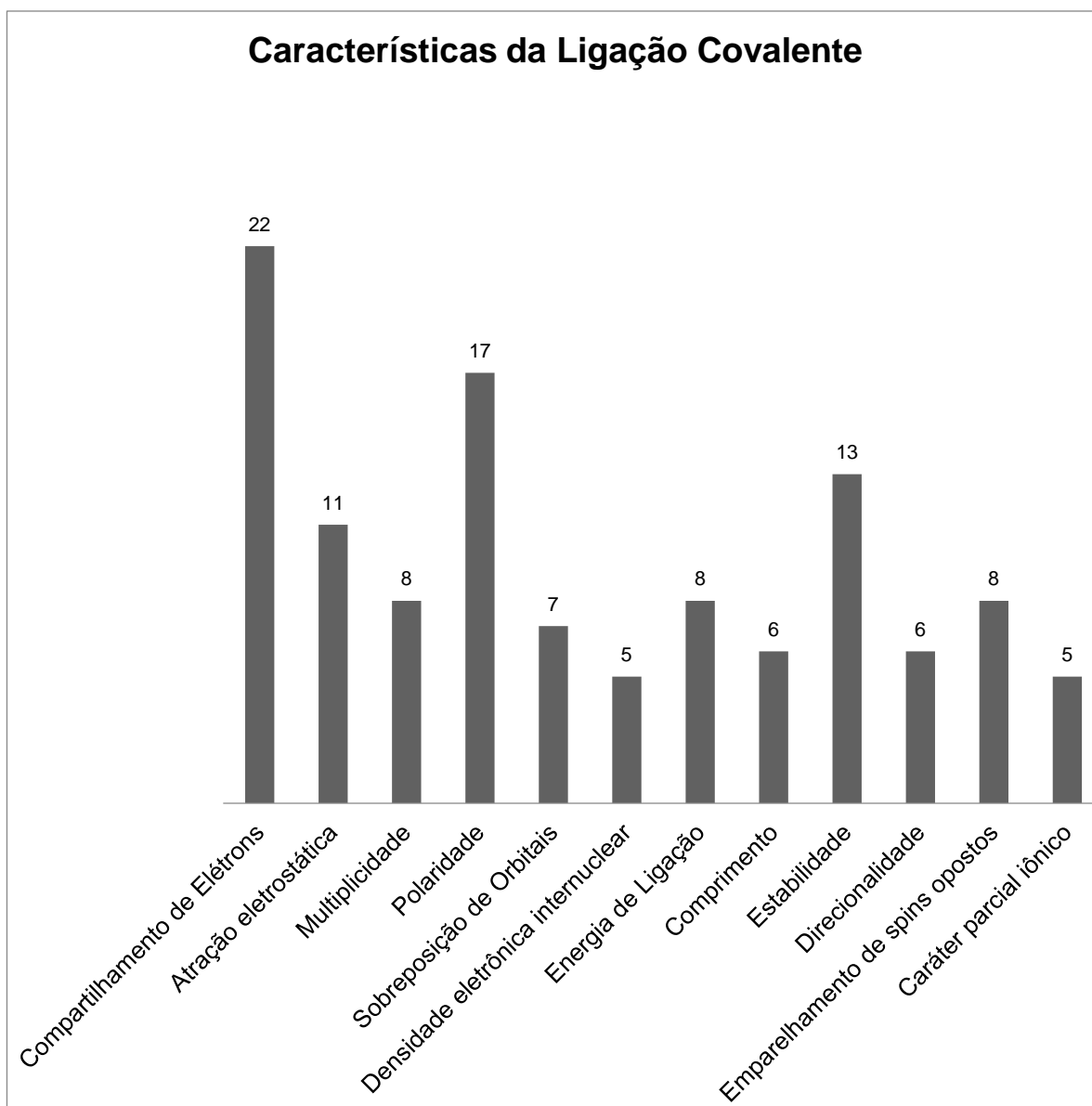
A estabilidade foi a segunda característica da ligação covalente mais citada nos estudos analisados. Das treze pesquisas que a citaram, apenas uma (SILVA, 2016) não empregou a regra do octeto para justificar a estabilidade dos átomos após a formação da uma ligação covalente. Diversos estudos criticam a utilização da regra do octeto para explicar a estabilidade dos átomos (MORTIMER; MOL; DUARTE, 1994; NAHUM *et al.*, 2008). Esses estudos afirmam que a regra do octeto potencializa o surgimento de concepções alternativas e dificulta a aprendizagem dos fatores energéticos relacionados às ligações químicas. Embora oito (08) pesquisas abordem a ligação química na perspectiva quântica, apenas uma recusa-se a empregar a regra do octeto e busca explicar a estabilidade a partir do abaixamento da energia potencial do sistema ocasionada pela formação da ligação covalente.

A atração eletrostática entre núcleos e elétrons foi citada onze (11) vezes nos estudos analisados. No entanto, muitas vezes o caráter eletrostático da ligação covalente não é bem compreendido pelos estudantes da escola básica que,

segundo Riboldi, Pliego e Odetti (2004), dão a entender que “forças” estranhas e de caráter desconhecido levam à formação de ligações covalentes. Essa característica pertence à abordagem clássica da ligação covalente, pois desconsidera que fatores quânticos contribuam para a formação das ligações químicas. Pauling (1960), apoiado na teoria Quântica, considera que a energia de ressonância é a responsável pela diminuição da energia total do sistema e conseqüentemente pela formação da ligação covalente. Nessa perspectiva, a contribuição das forças eletrostáticas seria pequena.

A polaridade foi uma das características mais citadas, na maioria das vezes, apenas para definir os conceitos de ligações covalentes polares e apolares. No entanto, a polaridade determina muitas propriedades da ligação covalente e da molécula, portanto, deveria ser discutida em detalhes no ensino das ligações químicas. Sobre essa característica, Birk e Kurtz (1999) afirmam que muitos estudantes acreditam que uma molécula é polar apenas por causa de suas ligações polares, o que está incorreto do ponto de vista das teorias atuais de ligação química, como no caso do metano, cuja molécula apolar que apresenta quatro ligações polares.

A sobreposição de orbitais (citada sete vezes) e o emparelhamento de elétrons com spins opostos (citado oito vezes) foram as únicas características do modelo quântico citadas. O gráfico a seguir apresenta a frequência das características da ligação covalente nos estudos analisados:

Figura 6 – Características da ligação covalente em teses e dissertações.

Fonte: Própria.

A análise da literatura de ensino de química realizada nos bancos de teses e dissertações identificou um número razoável de pesquisas nacionais sobre ligação química e sobre a ligação covalente. A análise desses estudos é importante para compreender como esse conceito vem sendo abordado nos últimos anos nas pesquisas da área de Ensino de Química. Esses dados reforçam a justificativa para esta pesquisa, tendo em vista que, nenhuma das pesquisas analisadas investigou simultaneamente os aspectos teóricos e didáticos do conceito de ligação covalente.

4.2 ANÁLISE DAS RESPOSTAS AO QUESTIONÁRIO

Como o objetivo desta pesquisa é analisar a conceituação da ligação covalente, as respostas das cinco primeiras questões do questionário foram analisadas conjuntamente com a finalidade de identificar características desse conceito citadas voluntariamente pelos sujeitos de pesquisa. As outras cinco questões referem-se às características da ligação covalente e foram analisadas posteriormente.

Para responder às questões de 1-5, os estudantes precisavam citar voluntariamente características do conceito de ligação covalente. A análise dos dados permitiu a categorização das respostas dos estudantes dentro de três modelos: modelo clássico, modelo quântico e modelo híbrido (mistura dos modelos clássico e quântico). A partir da análise das definições das características da ligação covalente foi possível estabelecer a classificação dos modelos explicativos empregados pelos estudantes e construir o Quadro 4:

Quadro 4 – Categorização das características da ligação covalente segundo os modelos explicativos.

Tipo de Reposta / Característica	Modelo Clássico	Modelo Quântico	Modelo Híbrido
Compartilhamento de elétrons	E2, E3, E4, E5, E8, E12, E13	E1	E6, E7, E9, E10, E11
Estabilidade do Sistema	E2, E3, E8, E12, E13	E1	E6, E7, E10, E11
Multiplicidade da Ligação	E3, E8, E12, E13	E1	E10
Polaridade da Ligação	E3, E5, E8	-	-
Energia da Ligação	E12	-	E7
Direção da Ligação	-	-	E7
Comprimento da Ligação	-	-	E9
Densidade Eletrônica Internuclear	-	-	E9
Ressonância	-	E1	-
Sobreposição de Orbitais	-	E1	E9
Emparelhamento de Spins	-	-	E7

Fonte: Própria.

A predominância do modelo clássico da ligação covalente nas respostas revela a forte influência de uma conceituação mais elementar para explicar a ligação covalente, que é proveniente da educação Básica e de disciplinas de Química Geral

do curso de Licenciatura em Química. Tal modelo é insuficiente para explicar adequadamente a estrutura submicroscópica da matéria, que por sua vez, prescinde de conceitos mais sofisticados e oriundos do modelo quântico.

A existência de um modelo híbrido da ligação covalente sugere que os estudantes aprenderam parcialmente os modelos clássico e quântico da ligação covalente, porém não estão conscientes da sua distinção e os empregam como se formassem um único modelo explicativo. A baixa utilização do modelo quântico da ligação covalente indica que esse modelo é pouco desenvolvido nos estudantes.

De acordo com Bouayad *et al.*, (2014), os conceitos fundamentais do modelo quântico da ligação química são, apenas, parcialmente dominados por estudantes de graduação. Ainda segundo esses autores, entre os principais obstáculos à compreensão das teorias quânticas de ligação química podem ser mencionados: I- a própria natureza da teoria quântica fundada no formalismo matemático e, portanto, não relacionada com intuições ordinárias; II- ausência de relações intuitivas ordinárias; III- falta de relações aparentes com a experiência. Por isso, parte das características da ligação covalente (direção, comprimento, densidade eletrônica, ressonância, sobreposição de orbitais, emparelhamento de spins) não foi explicada pela maioria.

Os dados da literatura da área de ensino corroboram com as respostas do questionário em relação a predominância do modelo clássico da ligação covalente entre os estudantes. Dessa forma, verifica-se que pesquisa-se muito pouco sobre o modelo quântico da ligação covalente, que é ensinado, mas, conforme verificado, é insuficientemente desenvolvido nos estudantes pesquisados. Contrariamente, a maior parte das pesquisas sobre o ensino da ligação covalente centra-se sobre o modelo clássico, que é mais desenvolvido entre os estudantes. Nesse sentido, recomenda-se o inverso disso, ou seja, que o modelo quântico seja mais enfatizado tanto no ensino da ligação covalente quanto nas pesquisas sobre esse conceito.

No Quadro 5 estão identificadas as características do conceito de ligação covalente citadas voluntariamente por cada sujeito de pesquisa:

Quadro 5 – Características da ligação covalente citadas pelos estudantes nas questões 1-5.

Estudantes / Características	E1	E2	E3	E4	E5	E6	E7	E8	E9	E10	E11	E12	E13
Compartilhamento de Elétrons	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
Sobreposição de Orbitais	x								x				
Densidade Eletrônica Internuclear									x				
Direção da Ligação							x						
Estabilidade do Sistema	x	x	x			x	x	x		x	x	x	x
Multiplicidade da Ligação	x							x		x		x	x
Comprimento da Ligação			x						x				
Energia da Ligação							x					x	
Polaridade da Ligação			x		x			x					
Ressonância	x												
Emparelhamento de Spins							x						

Fonte: Própria.

Os dados do Quadro 5 mostram que a característica do conceito de ligação covalente mais citada foi o compartilhamento de elétrons. Essa característica foi mencionada por todos os estudantes, porém, nenhum esclareceu o que entende por isso. Provavelmente, esse conceito científico não está suficientemente desenvolvido nos estudantes investigados. De uma forma geral, as respostas sugerem que há compartilhamento de elétrons quando não ocorre a transferência de elétrons, ou seja, essa característica é utilizada para diferenciar a ligação covalente da ligação iônica. Por compartilhamento, as respostas se limitam a sugerir que os elétrons compartilhados pertencem simultaneamente aos átomos que estão ligados. As respostas transcritas a seguir ilustram isso:

E2: *O elemento Cl possui em sua eletrosfera 7é; desta forma, ele tem a tendência a receber 1é, para formar o octeto, no caso de ligações iônicas, ou compartilhar no caso de ligações covalentes.*

E3: [...] são ligações em que não há transferência de elétrons, mas sim compartilhamento.

E5: Em uma ligação covalente existe um compartilhamento de elétrons. Tanto um elemento químico como o outro irão compartilhar o mesmo elétron.

E12: Logo, quando há um compartilhamento, o par de elétrons pertence a ambos os átomos, os elétrons ficam ao redor dos dois.

A ausência de clareza acerca do compartilhamento de elétrons também foi verificada por Fernandez e Marcondes (2006, p. 21):

A ideia de compartilhamento parece pouco elaborada entre os estudantes, pois alguns pensam que os pares de elétrons são compartilhados igualmente nas ligações covalentes, enquanto outros manifestam a ideia de que na ligação covalente há o compartilhamento de um único elétron entre os dois átomos.

Alguns estudantes afirmaram que a ligação covalente “é o compartilhamento de elétrons” (E10 e E11). Boo (2000) adverte que essa é uma concepção alternativa, pois, segundo ele, a ligação covalente é uma força atrativa entre dois átomos. Mais precisamente, a ligação é o resultado da força que se estabelece entre dois átomos ou grupos de átomos (IUPAC, 2019).

A literatura em ensino de química aponta para diversas concepções sobre o compartilhamento de elétrons. Em um estudo sobre o ensino da ligação covalente, Erman (2017), identificou a seguinte concepção alternativa: uma ligação covalente é formada quando dois átomos compartilham dois ou mais pares de elétrons livres. Outros autores reforçam que o compartilhamento de elétrons é pouco compreendido pelos estudantes (FERNANDEZ; MARCONDES, 2006; NICOLL, 2001).

Os livros didáticos de Química Geral do Ensino Superior explicam o compartilhamento de elétrons apenas por meio da atração eletrostática entre os núcleos e os elétrons dos átomos que participam da ligação covalente (ATKINS; JONES, 2012; BROWN *et al.*, 2016; RUSSELL, 1994). Essa limitação pode

desencadear uma visão limitada dessa característica que distingue a ligação covalente dos demais tipos de ligação química.

As dificuldades de compreensão em relação ao compartilhamento de pares eletrônicos precisam ser minimizadas, visto que, essa característica é a mais enfatizada no ensino da ligação covalente. Isso pode ser realizado pelo esclarecimento desse conceito possibilitado pelo modelo quântico, a partir da sobreposição de orbitais, da densidade eletrônica internuclear e do emparelhamento de spins.

Observa-se que o compartilhamento de elétrons foi a característica do conceito de ligação covalente mais citada na literatura de ensino de química e pelos estudantes no questionário. Esse dado mostra a ênfase nessa característica, que mesmo assim, é compreendida de forma limitada pelos estudantes.

A estabilidade foi citada por dez estudantes. Destes, apenas um (E1) não usou a regra do octeto em sua explicação. Esse dado demonstra a persistência do modelo clássico da ligação covalente entre os estudantes pesquisados. Segue a resposta fornecida por E6:

E6: *Um dos tipos de ligação é a covalente, nela, dois elementos instáveis compartilham elétrons para cada um assumir a configuração de um gás nobre.*

Esse tipo de resposta foi dado por nove estudantes. O uso acrítico e deliberado da regra do octeto tem sido alvo de críticas de diversos pesquisadores que defendem o uso de argumentos energéticos para explicar a estabilidade do sistema após a formação das ligações químicas (ERMAN, 2017; MORTIMER; MOL; DUARTE, 1994; NAHUM *et al.*, 2008; PENHA, 2014; VENKATARAMAN, 2017).

Apenas E1 utilizou o modelo quântico para explicar a estabilidade do sistema:

E1: *[...] Essa junção dos orbitais para formar o orbital molecular estabiliza os átomos, deixando-os com energias mais baixas que quando individualmente, isso faz com que eles permaneçam em forma molecular.*

A resposta de E1 aponta a redução da energia do sistema atômico ao se ligar. E1 utilizou elementos da TOM para explicar a estabilidade do sistema após a formação da ligação covalente. No entanto, citou apenas a contribuição do orbital molecular ligante, responsável pelo abaixamento da energia do sistema, tornando-o estável, porém, quando os orbitais atômicos se combinam, também é formado um orbital molecular antiligante, que é responsável pelo aumento da energia do sistema, tornando-o instável. Para que se forme a ligação covalente, é necessário que o abaixamento de energia proporcionado pelo orbital molecular ligante seja maior do que aumento da energia causado pelo orbital molecular antiligante (COULSON, 1961).

A estabilidade do sistema ligado foi a segunda característica mais citada na literatura de ensino de química e pelos estudantes no questionário. Isso sugere que essa característica é uma das mais importantes do sistema conceitual referente ao conceito de ligação covalente. Segundo a literatura, nas explicações sobre a estabilidade, os professores devem enfatizar os aspectos termodinâmicos em detrimento da regra do octeto (MORTIMER, MOL, DUARTE, 1994; NAHUM *et al.*, 2008). Além disso, numa perspectiva associada ao modelo clássico, outros estudos sugerem ênfase nas forças eletrostáticas entre os átomos que formam a ligação covalente (JOKI *et al.*, 2005; VENKATARAMAN, 2017).

Os livros didáticos de Química Geral destinados ao Ensino Superior, de uma forma geral, iniciam a explicação da ligação covalente destacando a estabilidade do sistema ligado adquirida por meio do octeto de elétrons. Só depois, em um capítulo dedicado os fundamentos do modelo quântico a estabilidade é explicada por meio da diminuição da energia total do sistema (ATKINS; JONES, 2012; BROWN, *et al.*, 2016). Porém, como o modelo quântico não é enfatizado nas disciplinas de Química Geral, prevalece a explicação da estabilidade segundo a regra do octeto.

Diante das respostas fornecidas pelos estudantes, verificou-se que são necessários mais esforços e reflexões para que os aspectos energéticos que envolvem a formação da ligação covalente sejam ensinados e aprendidos. Isso envolve tanto a noção termodinâmica de mínimo de energia no estado de equilíbrio de sistemas fechados, quanto o princípio da mínima ação nos processos de sistemas dinâmicos. Também é necessário demonstrar que a regra do octeto

apresenta várias exceções, ao passo que a redução da energia do sistema possui validade universal.

A multiplicidade das ligações covalentes foi citada por cinco estudantes. Quatro deles apenas citaram a ocorrência de ligações covalentes simples, duplas e triplas (E1, E8, E10 e E13). Apenas E12 forneceu uma explicação para a multiplicidade das ligações covalentes:

E12: *[...] em uma ligação covalente simples há o compartilhamento de um par de elétrons, na ligação covalente dupla há o compartilhamento de dois pares de elétrons e na tripla, três pares são compartilhados.*

Essa explicação está correta, mas é incompleta, pois lhe faltam outras características do conceito de ligação covalente para explicar a formação de ligações duplas e triplas, tais como: sobreposição de orbitais, direção da ligação e densidade eletrônica internuclear.

Verificou-se que nenhum dos estudantes utilizou o modelo quântico da ligação covalente, mesmo levando em consideração que conceitos básicos de TLV e TOM, geralmente, são ensinados em disciplinas introdutórias de Química Orgânica para explicar as ligações covalentes múltiplas formadas pelos átomos de Carbono. De fato, os estudantes pesquisados neste estudo cursaram a disciplina *Química Orgânica LI* e tanto na ementa quanto na bibliografia recomendada desse componente curricular constam os conteúdos relacionados aos fundamentos da TLV e da TOM (BRUICE, 2006; CONSTANTINO, 2008; SOLOMONS; FRYHLE, 2012; VOLLHARDT; SCHORE, 2013).

A polaridade da ligação covalente foi citada por três estudantes (E3, E5 e E8). No entanto, nenhum deles explicou corretamente o que isso significa. Segundo E8:

E8: *Ligação covalente é um tipo de ligação que ocorre entre átomos de um ametal, de um ametal com um átomo de Hidrogênio ou entre dois átomos de Hidrogênio. Aonde esses átomos irão “compartilhar” elétrons entre si, devido a diferença de eletronegatividade entre eles ser baixa ($\Delta E < 2,1$) ou até mesmo nula.*

Nessa resposta, E8 não mencionou explicitamente os termos 'ligação polar' ou 'ligação apolar', mas deu a entender que existem algumas ligações covalentes nas quais há diferença de eletronegatividade entre os átomos (ligação covalente polar) e que existem também algumas ligações covalentes nas quais não há diferença de eletronegatividade entre os átomos (ligação covalente apolar).

Já E5 afirmou apenas que a ligação covalente H-H:

E5: *É uma ligação covalente de mesmo elemento químico. A diferença de eletronegatividade é igual a zero.*

Embora não citando que é uma ligação covalente apolar, E5 destacou que na ligação H-H não há diferença de eletronegatividade entre os átomos. Mesmo sem citarem o termo 'polaridade', E8 e E5 sugeriram que essa propriedade periódica confere alguma particularidade à ligação covalente. A seguir, encontra-se a resposta fornecida por E3:

E3: *Um bom exemplo é a ligação entre dois átomos de Cloro. Como são iguais, não há diferença de eletronegatividade e assim eles apenas compartilham os elétrons, um átomo não retira elétrons do outro. [...] Eletronegatividade (capacidade de ganhar ou perder elétrons).*

Nessa resposta, E3 afirmou que na ligação Cl-Cl não há diferença de eletronegatividade. Porém chama à atenção como esse estudante caracterizou a eletronegatividade: como uma propriedade que se refere à capacidade de um átomo de "ganhar ou perder elétrons". Essa definição de eletronegatividade consiste numa concepção alternativa, pois essa propriedade periódica, segundo Pauling (1960), refere-se à capacidade de um átomo para atrair os elétrons para si numa ligação química.

A sobreposição de orbitais, característica exclusiva do modelo quântico da ligação química, foi citada por apenas dois estudantes (E1 e E9). Enquanto E9 apenas mencionou, E1 explicou o que entende por sobreposição de orbitais:

E1: *Uma ligação ocorre quando orbitais dos átomos envolvidos na ligação se sobrepõem formando orbitais moleculares [...].*

Observa-se que E1 empregou a sobreposição de orbitais para explicar a ligação covalente segundo a TOM. No entanto, a sobreposição de orbitais só existe no contexto da TLV. Na TOM não há sobreposição, os orbitais se combinam gerando orbitais moleculares ligantes e antiligantes (COULSON, 1961).

O comprimento da ligação covalente foi citado por dois estudantes (E3 e E9). Nenhum deles utilizou o termo 'comprimento', mas afirmaram que numa ligação covalente os átomos devem estar a certa distância uns dos outros. Seguem as respostas fornecidas por esses estudantes:

E3: *Destacaria o fato de que para haver ligação é necessária a aproximação entre os átomos.*

E9: *Os elétrons são responsáveis pela atração e repulsão dos átomos. Os elétrons são atraídos pelo núcleo, mas nunca tocam nele, pois são repelidos pelos elétrons do átomo que estão atraídos, fazendo assim uma distância resultado dessa atração. A área dessa distância tem uma grande densidade de energia.*

Nessas respostas não foi mencionado que a distância entre os átomos numa ligação covalente corresponde à distância internuclear de equilíbrio, onde o sistema atinge o estado mais estável (IUPAC, 2019). Portanto, tais respostas estão incompletas, pois não é suficiente afirmar apenas que os átomos estão separados por certa distância. Além disso, E9 atribuiu a distância entre os átomos apenas às forças eletrostáticas entre núcleos e elétrons. Porém, o comprimento de uma ligação covalente está associado à energia da ligação, que por sua vez é definida, de acordo com Pauling (1960), por meio de contribuições clássicas (eletrostáticas) e quânticas (ressonância dos elétrons).

A energia de ligação foi citada por dois estudantes (E7 e E12). Enquanto E7 apenas mencionou essa característica, E12 respondeu:

E12: *Para que uma ligação ocorra, primeiro é necessário fornecer energia para a quebra das ligações já existentes nas moléculas para depois se formar a ligação covalente de átomos deficientes de elétrons, quando a ligação é formada há uma liberação de energia.*

Verifica-se que E12 não mencionou a origem da energia de ligação, apenas afirmou que a formação de uma ligação covalente ocorre juntamente com a liberação de energia e que a quebra de uma ligação covalente ocorre juntamente com a absorção de energia. Mesmo correta, essa resposta não explica porque algumas ligações covalentes são mais fortes do que outras. Para isso, é necessário recorrer ao modelo quântico, que é mais completo e ainda explica a origem das energias de ligação.

A densidade eletrônica internuclear foi citada apenas por E9. Ele afirmou que a região entre os núcleos, em função das forças eletrostáticas de atração e repulsão “*tem uma grande densidade de energia*”. Porém, a região internuclear, segundo a IUPAC (2019) apresenta alta densidade eletrônica e não de energia oriunda de forças eletrostáticas entre núcleos e elétrons. Dessa forma, verifica-se que essa característica é pouco compreendida entre os estudantes pesquisados.

Em relação à direção da ligação covalente, apenas E7 citou “*a organização espacial dos átomos na molécula [...]*”. Verifica-se nesse trecho que E7 compreende que as ligações covalentes são direcionais, porém não explicou essa característica. Pelo visto, a direção da ligação covalente é uma característica entendida de forma insuficiente pelos sujeitos de pesquisa que responderam ao questionário.

A ressonância só foi citada por E1, segundo esse estudante, “*os elétrons determinam a ressonância das moléculas*”. Porém, E1 não forneceu mais explicações sobre a ressonância. Conforme mencionado no referencial teórico, a ressonância é uma característica do modelo quântico da ligação química, que muitas vezes é adaptada ao modelo clássico para explicar por que algumas substâncias só podem ser representadas corretamente por mais de uma estrutura (ATKINS; JONES, 2012).

O emparelhamento de spins foi apenas mencionado por E7. Essa é uma característica do modelo quântico da ligação covalente. Para E7, na ligação H-H:

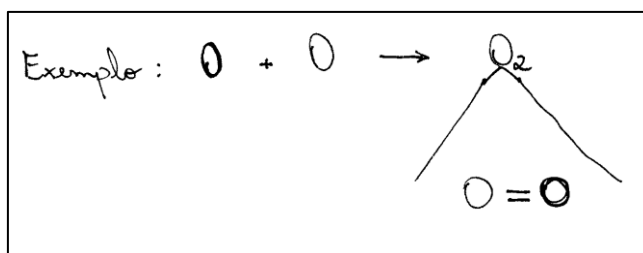
E7: [...] os elétrons são compartilhados nos subníveis de orbitais s e apresentam spins diferentes [...].

Essa resposta é incompleta, pois não é suficiente apenas citar, mas explicar o motivo pelo qual os spins dos elétrons compartilhados na ligação covalente são opostos. Segundo o modelo quântico, o emparelhamento de spins deve-se à minimização da energia do sistema, ou seja, essa configuração torna o sistema mais estável do que a configuração com spins iguais (HEITLER, 1956).

Diante das respostas citadas voluntariamente verificou-se que o compartilhamento de elétrons e a estabilidade atingida por meio da regra do octeto foram as características da ligação covalente mais citadas pelos estudantes. Além disso, segundo o Quadro 5, os estudantes citaram poucas características do conceito de ligação covalente. O máximo de características citadas foi cinco (E1 e E7) e o mínimo, uma (E4). Esses dados sugerem que o sistema conceitual da ligação covalente dos estudantes é limitado, pois apresenta poucos elementos, comparando-se com o mapa conceitual construído (figura 4), e que o conceito de ligação covalente foi aprendido parcialmente pelos estudantes pesquisados.

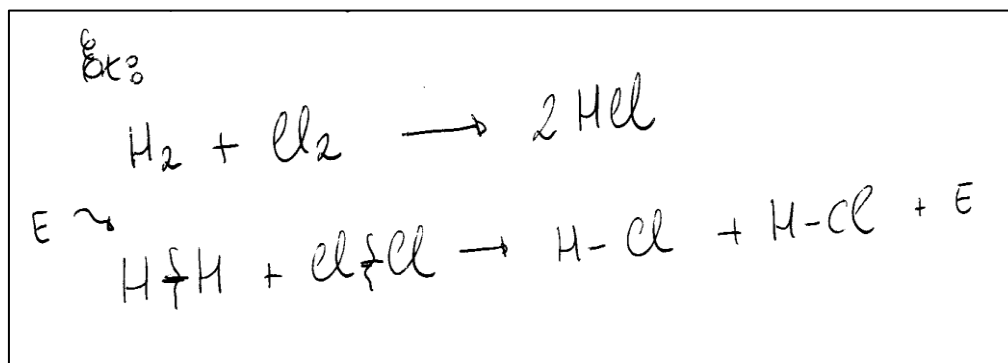
Em relação aos exemplos citados, observou-se que eles foram inseridos, na maioria das vezes, sem nenhum tipo de explicação, conforme foi solicitado. À luz da teoria histórico-cultural de Vigotski (2009), isso indica que os estudantes conhecem apenas o termo e desconhecem o conceito científico que o mesmo expressa. As respostas de E8 e E12 ilustram essa situação:

Figura 7 – Exemplo de ligação covalente fornecido por E8.



Fonte: Própria.

Figura 8 – Exemplo de ligação covalente fornecido por E12.



Fonte: Própria

Na Figura 7, E8 se refere à formação da molécula de Oxigênio (O_2) a partir de dois átomos de Oxigênio (O). Porém, em nenhum momento é indicado como ou porque a ligação covalente dupla $\text{O}=\text{O}$ é formada. Enquanto que na Figura 8, E12 trata a formação da ligação covalente H-Cl a partir da quebra das ligações H-H e Cl-Cl. No entanto, em nenhum momento esse processo é explicado. Ambos os exemplos são descontextualizados, pois não foram inseridos no contexto de uma explicação dos fenômenos que provavelmente expressam. Por isso, o vínculo entre o conceito geral de ligação covalente e os casos específicos é fraco.

Poucas vezes o exemplo foi colocado inserido dentro uma explicação, como fez E6:

E6: *Um exemplo é o cloreto de hidrogênio (HCl), onde o Cloro compartilha 1é com o Hidrogênio, que compartilha 1é de volta. O Cloro fica com 8é e o Hidrogênio com 2é, assumindo configuração de gás nobre.*

Na resposta acima, E6 justificou a formação da ligação covalente H-Cl por meio da regra do octeto (e do dueto, no caso do hidrogênio). Como o exemplo veio acompanhado de uma explicação, torna-se mais objetiva a sua interpretação. Nesse sentido, embora E6 tenha empregado o modelo híbrido da ligação covalente ao longo do questionário, nessa resposta, ele utilizou apenas o modelo clássico.

Exemplos acompanhados por explicações foram raros nas respostas dos estudantes. Essa dificuldade em pensar em casos mais concretos é típica de uma

fase da aprendizagem dos conceitos científicos segundo Vigotski (2009). Esse é mais um indício de que os estudantes aprenderam o conceito de ligação covalente de forma parcial ao longo da formação inicial, mesmo tendo cursado disciplinas de conteúdos químicos (Química LI, Química Inorgânica LI e LII, Química Orgânica LI, Físico-Química I) e didáticos (Prática Pedagógica no Ensino de Química I) relacionados às ligações químicas.

As questões de 6-10 abordavam algumas características do conceito de ligação covalente, a saber: energia da ligação, ressonância, direção da ligação, comprimento da ligação e multiplicidade da ligação. A análise dessas questões permitiu a classificação das respostas nas seguintes categorias: modelo clássico da ligação covalente, modelo quântico da ligação covalente, modelo híbrido da ligação covalente, outras respostas e não respondeu.

A partir da análise das respostas, foi possível classificar as respostas segundo o modelo explicativo adotado pelos estudantes e construir o Quadro 6:

Quadro 6 - Categorização das características da ligação covalente segundo os modelos explicativos.

Modelo Explicativo / Característica	Modelo Clássico	Modelo Quântico	Modelo Híbrido	Outras Respostas	Não Respondeu
Energia da Ligação	E4, E5, E6, E7, E8, E12	E1, E10	-	-	E2, E3, E9, E11, E13
Ressonância	E4, E5, E6, E7, E10, E11	E1	E9, E12	-	E2, E3, E8, E13
Direção da Ligação	E3, E5, E6, E7, E9	E10	E1	E4	E2, E8, E11, E12, E13
Comprimento da Ligação	E2, E3, E4, E5, E6, E7, E8, E9, E11, E12	E1	-	E10	E13
Multiplicidade da Ligação	E2, E3, E4, E5, E6, E8, E9, E10	E1, E7, E11	-	-	E12, E13

Fonte: Própria.

Em relação à energia da ligação covalente, a maioria das respostas empregou o modelo clássico e mencionaram apenas que a quebra de uma ligação exige a absorção de energia enquanto que a formação libera energia. Exemplos desse tipo de resposta encontram-se a seguir:

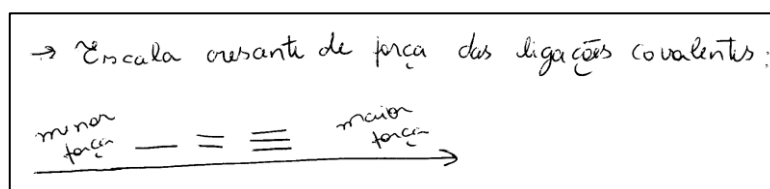
E6: Para formar, geralmente essa energia é liberada, haja visto que o composto formado depois da ligação é mais estável que antes, já para quebrar é necessária determinada energia [...].

E8: Quando a ligação é formada ocorre uma liberação de energia, enquanto a quebra ocorre com absorção de energia.

Nenhuma dessas respostas menciona a origem da energia da ligação covalente, que por sua vez, é explicada segundo o modelo quântico. Tais respostas não estão incorretas, mas não explicam a energia da ligação covalente. Tal fato está de acordo com a literatura internacional de Ensino de Química, que aponta a energia da ligação da ligação covalente como pouco compreendida pelos estudantes (COHEN; BEN-ZVI, 1992; HAPKIEWICZ, 1991;).

O modelo quântico foi utilizado para explicar a energia da ligação covalente apenas por E1 e E10. O primeiro citou apenas que o abaixamento da energia do sistema torna a ligação covalente mais forte, enquanto E10 utilizou a TLV para explicar que a energia da ligação depende da sobreposição dos orbitais. Além disso, ele relacionou a energia da ligação covalente ao comprimento da ligação e à multiplicidade. Para E10, as ligações múltiplas (duplas e triplas) são mais difíceis de quebrar, pois são constituídas por ligações σ e π . Além disso, E10 esboçou uma escala de força — em lugar de energia — para as ligações covalentes múltiplas:

Figura 9 – Escala de força para as ligações covalentes múltiplas segundo E10.



Fonte: Própria.

E10 relacionou a energia de ligação a três outras características que compõem o sistema conceitual da ligação covalente: sobreposição de orbitais, comprimento da

ligação e multiplicidade. Isso demonstra um bom domínio desse conceito. Ainda assim, percebe-se a ausência de uma explicação mais profunda em relação à origem da energia da ligação covalente, que segundo Pauling (1960), é proveniente, quase que totalmente, da energia de ressonância. Porém, como este conceito é controverso entre os químicos, termina sendo pouco discutido no ensino, com prejuízo para a compreensão da energia da ligação química.

Quanto à ressonância, a maioria dos estudantes em suas respostas empregou o modelo clássico. Na maior parte das respostas, o único aspecto enfatizado foi o movimento dos elétrons pela estrutura das substâncias, conforme pode ser verificado nas respostas a seguir:

E4: *Diria que os elétrons de uma espécie química nunca estariam estáticos, sempre estariam em constante mudança, podendo formar diferentes espécies químicas ao se ligarem com outras espécies químicas.*

E6: *Ressonância, assim como o próprio nome já sugere, é o fato de ficar indo e voltando [...].*

As respostas transcritas anteriormente não sugerem qualquer ligação com a teoria quântica, onde surgiu o conceito de ressonância aplicado à ligação covalente.

O modelo quântico apareceu apenas na resposta de E1:

E1: *Ressonância é quando elétrons envolvidos nas ligações duplas mudam de posição na molécula, ou seja, passam de um orbital para outro simultaneamente.*

Nessa resposta, observa-se que E1 utilizou o conceito quântico de orbital para explicar a mobilidade dos elétrons. Ainda assim, essa explicação não é suficiente para explicar a ressonância nas estruturas de substâncias covalentes.

Os estudantes E9 e E12 empregaram o modelo híbrido ao ressaltarem a mobilidade dos elétrons e das ligações covalentes do tipo π , conforme pode ser observado na resposta a seguir:

E12: *Ocorre ressonância quando a ligação π fica andando pela molécula, podendo estar tanto em um átomo como em outro e a estrutura de ressonância mais estável é aquela na qual a carga negativa está no elemento mais eletronegativo.*

Essa resposta apresenta elementos do modelo clássico e do modelo quântico da ligação covalente. A única característica do modelo quântico identificada foi a ligação π . Por outro lado, percebe-se o modelo clássico quando E12 menciona a eletronegatividade para justificar a estrutura mais estável. No modelo quântico, a estrutura mais estável é a que proporciona ao sistema a menor energia (PAULING, 1960). A ressonância foi pouco relacionada com outras características da ligação covalente, isso demonstra que a compreensão desse conceito é limitada por parte dos estudantes. Embora tenha surgido como uma analogia da ressonância clássica, a ressonância foi introduzida por Pauling (1928a) no contexto da ligação química para explicar a diminuição da energia total do sistema após os átomos se ligarem.

No que se refere à direção da ligação covalente, as respostas dos estudantes se mostraram erradas, pois a maior parte associou a direção da ligação com a eletronegatividade dos átomos, como pode ser observado nas respostas a seguir:

E5: *Usaria o Ácido Clorídrico como exemplo. O Cloro é mais eletronegativo então a direção seria do hidrogênio para o Cloro. O Cloro atrairia os elétrons para ele por ser mais eletronegativo.*

E9: *As ligações covalentes tendem a ser mais direcionadas aos átomos mais eletronegativos, átomos que possuem a propriedade de atrair elétrons devido à força de atração do núcleo e seu número de elétrons, quanto mais prótons e menos elétrons no átomo, maior é a eletronegatividade.*

Nessas respostas os estudantes provavelmente confundiram a polaridade da ligação com o sentido do deslocamento dos elétrons (em relação ao átomo mais eletronegativo) da ligação. A polaridade da ligação se refere ao deslocamento da nuvem eletrônica, enquanto que a direção se relaciona com a disposição espacial dos elétrons compartilhados entre os átomos que formam a ligação covalente.

O modelo quântico só foi utilizado por E10 para explicar a direção da ligação covalente. Para E10:

E10: *A direção se dá pelo orbital com os elétrons disponíveis.*

A resposta de E10 apresenta uma explicação em termos de orbitais. Essa resposta está incompleta, pois são necessárias algumas condições para que a ligação covalente seja estabelecida, tais como: orbitais semipreenchidos, orientação espacial dos orbitais favoráveis e energia semelhante dos orbitais (PAULING, 1960).

A resposta de E1 é híbrida pois mencionou a formação de orbitais moleculares e a eletronegatividade como determinantes para a direção da ligação covalente.

E1: *[...] átomos mais eletronegativos terão uma maior atração dos seus elétrons com o núcleo, logo terão uma maior blindagem e não cederão seus elétrons facilmente, mais compartilharão na formação dos orbitais moleculares.*

A resposta de E1 não explica a direção da ligação covalente e ainda mistura conceitos dos modelos de ligação covalente clássicos e quânticos.

Pelo visto, a direção da ligação covalente é pouco compreendida pelos estudantes, visto que apenas um (E10), explicou de forma parcialmente correta.

Porém, uma vez que nos exemplos fornecidos, as ligações químicas aparecem corretamente direcionadas, pode ser que não tenham compreendido a questão, apesar da validação realizada.

O comprimento da ligação covalente foi explicado pelos estudantes, quase que totalmente, por meio do modelo clássico. Apenas um estudante (E1) utilizou o

modelo quântico. No modelo clássico, o comprimento da ligação covalente é determinado pelas forças eletrostáticas entre núcleos e elétrons. As respostas de alguns estudantes ilustram o emprego do modelo clássico para explicar o comprimento da ligação covalente:

E12: *O comprimento de uma ligação tem haver com a repulsão dos elétrons, tornando-as maiores ou menores de acordo com a quantidade de elétrons presentes.*

E3: *Sobre o comprimento, usaria o argumento da diferença de eletronegatividade para justificar a força da ligação. Quanto maior a diferença, maior a atração e assim menor a ligação.*

Essas respostas utilizam apenas as forças eletrostáticas para justificar o comprimento da ligação covalente. Porém, o que determina o comprimento da ligação covalente é a distância internuclear de equilíbrio, que confere ao sistema a menor energia, tornando-o estável (PAULING, 1960). Ainda no modelo clássico, outros estudantes mencionaram o raio atômico dos átomos para justificar o comprimento da ligação covalente:

E2: *Vai depender do tamanho dos átomos envolvidos na ligação, quando um possui um tamanho elevado enquanto um outro possui menor, o comprimento da ligação será mais curto.*

E4: *O comprimento da ligação poderia ser igual ou diferente, dependendo do raio átomo de cada espécie química.*

As respostas transcritas anteriormente não estão erradas, mas sugerem o desconhecimento dos estudantes de que os raios atômicos (raios covalentes) são obtidos a partir da distancia interatômica, e não, o contrário. A distância internuclear

de equilíbrio é obtida empiricamente por meio de espectroscopia de: IV, raios-X e difração de elétrons (PAULING, 1960).

Apenas E1 empregou características do modelo quântico da ligação covalente:

E1: *Ligações σ tem comprimentos menores, pois os orbitais estão entre os núcleos, logo a atração é maior. Difícil de quebrar, ligação forte. Já as π são ligações que não ficam entre os núcleos, tem uma atração menor, um comprimento maior, então são mais fáceis de quebrar.*

E1 citou os orbitais e as ligações σ e π , todos conceitos quânticos. Essa resposta está parcialmente correta, mas não explica o comprimento da ligação covalente ou a existência de ligações σ de comprimentos diferentes. Nenhum dos estudantes mencionou a distância internuclear de equilíbrio em suas respostas, demonstrando desconhecer essa característica do conceito de ligação covalente.

Quanto à multiplicidade da ligação covalente, mais uma vez, a maioria das resposta empregou o modelo clássico, justificando a formação das ligações covalentes duplas e triplas por meio da quantidade de elétrons envolvida:

E4: *Quando há o compartilhamento entre dois elétrons forma-se dupla ligação. Quando há o compartilhamento entre três elétrons forma-se tripla ligação.*

E8: *Ligação simples é quando apenas um elétron é compartilhado com um determinado átomo. Ligação dupla é quando dois elétrons são compartilhados com um determinado átomo. Ligação tripla é quando três são compartilhados com um determinado átomo.*

As respostas transcritas anteriormente estão incompletas, pois não é só a quantidade de elétrons que influencia a multiplicidade da ligação covalente. Outros fatores como a direção e a sobreposição dos orbitais são fundamentais para o estabelecimento das ligações duplas e triplas. Além disso, a ideia de

compartilhamento se refere aos pares de elétrons da ligação, e não, à quantidade de elétrons que um dos átomos cede para ser compartilhada.

Os estudantes E1, E7 e E11 utilizaram o modelo quântico para explicar a multiplicidade da ligação covalente:

E11: *Bom, o Carbono sofre hibridização para formar quatro ligações simples. Ligações duplas possuem um orbital p, que forma a ligação dupla, esta ligação tem maior interação que a ligação simples. A ligação tripla, sp, possui interação maior, tanto que a mesma nem rotaciona [...].*

E1: *Poderia usar a distribuição, os orbitais e os spins para mostrar a hibridização dos Carbonos sp^3 , sp^2 e sp [...].*

Mesmo citando o modelo quântico, essas respostas estão incompletas demonstrando que esses estudantes dominam parcialmente essa característica da ligação covalente.

Poucos estudantes forneceram exemplos das características da ligação covalente citadas no questionário. Os poucos exemplos fornecidos foram colocados de forma descontextualizada, quase sempre sem qualquer explicação.

Em relação à energia da ligação covalente, apenas quatro estudantes forneceram exemplos E4, E5, E7 e E8. Esses estudantes mencionaram as ligações covalentes das seguintes substâncias: H_2O , HCl , O_2 e N_2 . Porém, apenas E5 justificou a energia da ligação covalente $H-Cl$ por meio da eletronegatividade dos átomos. No entanto, não é a eletronegatividade, mas a energia de ressonância, segundo Pauling (1960), que determina a energia da ligação covalente.

Quanto à ressonância, oito estudantes citaram exemplos (E1, E4, E5, E6, E7, E10, E11 e E12). Destes seis citaram a molécula de benzeno (E1, E4, E6, E7, E10, e E12), um a molécula de HCl (E5) e um o radical carbonila (E11). Porém apenas três estudantes forneceram explicações para os exemplos (E10, E11 e E12).

Citando o benzeno como exemplo, E10 e E12 afirmam que:

E10: *O par de elétrons vai alternando para completar as quatro ligações dos Carbonos.*

E12: *As ligação no benzeno não estão estáticas e por isso o comprimento das ligações é intermediário entre o comprimento de uma ligação simples e o comprimento de uma ligação dupla.*

A resposta de E10 consiste numa concepção alternativa, pois a ressonância não tem a finalidade de completar as quatro ligações do átomo de carbono. Por outro lado, a resposta de E12 sugere a movimentação das ligações covalentes na molécula do benzeno e não explica a ressonância. Dessa forma, observa-se que pela limitação da quantidade exemplos e pelas explicações, os estudantes pesquisados compreendem pouco a ressonância.

Em relação à direção da ligação covalente, apenas cinco estudantes forneceram exemplos (E3, E4, E5, E6 e E10). Destes, três utilizaram o modelo clássico para explicar os exemplos e fornecidos (E3, E5 e E6) e apenas um utilizou o modelo quântico (E10). As respostas de E3 e E6 encontram-se a seguir:

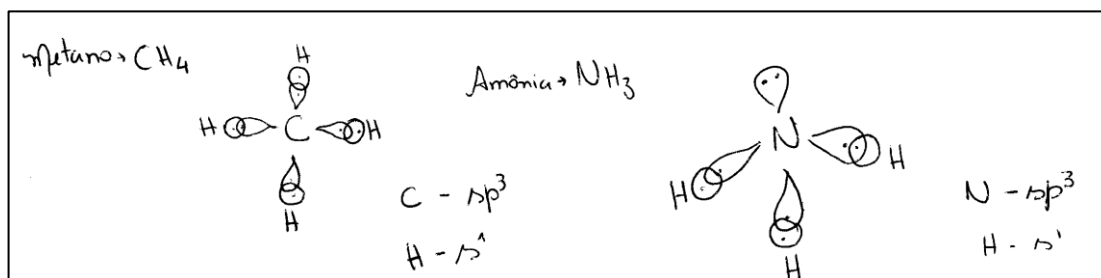
E3: *[...] tentaria mostrar as direções da molécula da água. Diria que os pares de elétrons livres no Oxigênio provocam uma repulsão nos átomos de Hidrogênio e assim a molécula adquire aquela forma.*

E6: *CO₂ é apolar porque os polos têm a mesma intensidade. CH₂O é polar porque os polos não têm a mesma intensidade.*

Essas respostas sugerem que os estudantes confundem direção da ligação com polaridade e com geometria molecular, nenhum deles conseguiu explicar adequadamente a direção da ligação covalente.

E10 apenas desenhou as moléculas e não forneceu qualquer explicação para direção das ligações covalentes nelas:

Figura 10 – Exemplo fornecido por E10 para a direção da ligação covalente.



Fonte: Própria.

A Figura 10 sugere o emprego do modelo quântico por E10 por representar e mencionar a hibridização de orbitais atômicos. Mas nada nessa Figura explica a direção da ligação covalente na molécula de Amônia (NH_3) ou de Metano (CH_4) citadas como exemplo.

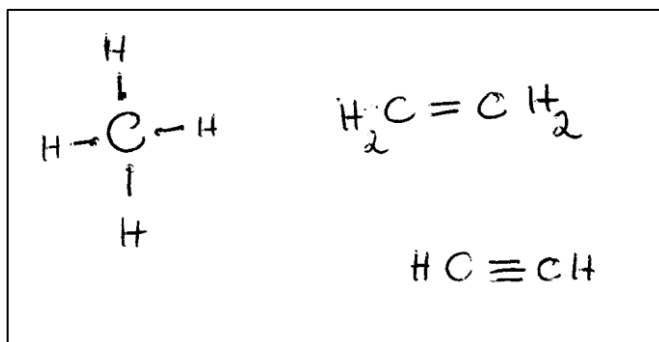
Pela limitada quantidade de exemplos fornecidos e pelas explicações insuficientes, percebe-se que os alunos conhecem pouco sobre a direção da ligação covalente.

Quanto ao comprimento da ligação covalente, apenas E5 e E7 forneceram exemplos. Enquanto E5 apenas mencionou que a nuvem eletrônica entre o átomo de H e o de Cl na molécula de HCl tem um comprimento, E7 afirmou que na molécula de Metanol (CH_3OH) os comprimentos das ligações covalentes C-H, C-O e O-H são diferentes.

De uma forma geral, a característica comprimento de ligação foi a que apresentou menos exemplos. Isso indica pouca familiaridade dos estudantes. Além disso, nos dois exemplos fornecidos, as explicações foram muito superficiais.

Quanto à multiplicidade da ligação covalente, apenas seis estudantes forneceram exemplos (E2, E3, E5, E8, E10 e E11). Os exemplos mais citados foram os hidrocarbonetos alifáticos, conforme indica a Figura 11:

Figura 11 – Exemplo de ligação covalente múltipla fornecido por E2.



Fonte: Própria.

Nenhum dos estudantes forneceu qualquer explicação para os exemplos citados em suas respostas.

A análise das respostas dos estudantes das questões 6-10 revelou que eles compreendem parcialmente as características do modelo clássico da ligação covalente. As características referentes ao modelo quântico foram pouco citadas. Além disso, os estudantes forneceram poucos exemplos e de forma descontextualizada, sem qualquer explicação. A dificuldade de exemplificação dos conceitos científicos é reconhecida por Vigotski (2009) como uma dificuldade no curso do desenvolvimento desse tipo de conceito, que é abstrato. Nesse sentido, observou-se que os estudantes apresentam dificuldades em mencionar e explicar casos específicos de ligação covalente. Geralmente eles explicavam as características do conceito de ligação covalente, porém, quase nada dessa explicação era aproveitada para explicar os exemplos, quando fornecidos.

Diante do exposto, a análise das respostas ao questionário mostrou que os estudantes apresentam sistemas conceituais pobres para ligação covalente, seja pela pequena quantidade de elementos, seja pelas poucas relações entre os mesmos. Também constatamos a predominância do modelo clássico da ligação covalente, o pouco conhecimento do modelo quântico e a existência de várias concepções alternativas. A carência de relações conceituais faz com que suas respostas sejam incompletas, truncadas, dificulta a elaboração de explicações e a articulação entre as definições genéricas e os exemplos concretos.

Os livros didáticos do ensino superior de química deixam a desejar, tanto na caracterização clara da ligação covalente quanto na explicação de cada

característica. O estudo de Erman (2017) identificou diversas concepções alternativas sobre a ligação covalente em livros didáticos, demonstrando a fragilidade conceitual desses materiais didáticos, que devem ser utilizados com a devida cautela, visto que podem induzir ao erro.

Verificamos, ainda, que tais problemas não são locais, posto que a literatura internacional recente sobre ensino de ligação química covalente identificou aproximadamente as mesmas dificuldades de aprendizagem e concepções alternativas (ERMAN, 2017; JOKI, AKSELA, 2018; PRODJOSANTOSO, HERTINA; IRWANTO, 2019; TSARPALIS; PAPPA; BYERS, 2018).

Para aprofundar esses resultados foram realizadas entrevistas semiestruturadas, que serão discutidas a seguir.

4.3 ANÁLISE DAS ENTREVISTAS

As entrevistas realizadas contaram com dois momentos. No primeiro, as perguntas versavam sobre o conceito e as características da ligação covalente. No segundo momento, os estudantes responderam três problemas que requeriam o emprego do conceito e o conhecimento de algumas características da ligação covalente. Esses dois momentos serão analisados separadamente a seguir.

4.3.1 Análise das Respostas às Perguntas das Entrevistas

Dos estudantes entrevistados, apenas E7 nunca ensinou o conteúdo de ligações químicas. Os demais (E1, E2, E6 e E8), afirmaram ter ensinado ligações químicas no Ensino Fundamental II (E1 e E2) e no Ensino Médio (E1, E6 e E8). É provável que a atividade docente tenha contribuído para que as respostas dos estudantes se concentrem no modelo clássico da ligação covalente, pois é esse modelo que eles ensinam.

De acordo com E1, suas respostas são influenciadas tanto pelos conteúdos que ensina quanto pelo que aprendeu durante a sua formação inicial na disciplina

Química Inorgânica LI. Porém, o modelo estudado nessa disciplina é o quântico (ver abaixo), de modo que, há uma diferença entre o que E1 diz ter aprendido sobre ligação covalente e o que ensina como professor.

Em relação às disciplinas em que os conteúdos de ligações químicas foram abordados, foram citados os componentes curriculares: Química LI (E1, E6, E7 e E8); Química Inorgânica (E1, E6 e E7); Físico-Química LI (E6, E7 e E8). A disciplina Química LI, aborda a ligação covalente do ponto de vista clássico, acrescentando poucos elementos da teoria quântica como os orbitais e os spins. Em uma abordagem diferente, a disciplina Química Inorgânica LI trata a ligação covalente numa perspectiva mais quântica destacando os orbitais atômicos *d* e *f*, muito empregados para explicar as ligações covalentes nos íons complexos e nos compostos de coordenação. Somente na Físico-Química LI, segundo a ementa, a ligação covalente é abordada em termos estritamente quânticos. A disciplina Química Orgânica LI não é mencionada pelos estudantes, mesmo abordando inicialmente princípios básicos da TLV e da TOM. A única disciplina que aborda o ensino das ligações químicas, Prática Pedagógica no Ensino de Química I, também não foi citada.

Conforme apresentado anteriormente, a disciplina Química LI foi a mais citada pelos estudantes, o que demonstra sua influência na formação inicial desses estudantes. Essa disciplina aborda a ligação covalente segundo o modelo clássico, inserindo algumas características do modelo quântico (orbital e spin). Essa mistura de modelos, sem a devida transição entre o clássico e o quântico, pode resultar em dificuldades de aprendizagem por parte dos estudantes e conduzir a um modelo híbrido. Toma (1997) alerta para os cuidados necessários para o ensino da ligação química segundo as abordagens clássica ou quântica. A disciplina Físico-Química LI foi citada por três estudantes, porém as respostas ao questionário mostraram que o modelo quântico foi apenas parcialmente aprendido pelos estudantes.

Os estudantes afirmaram que estudaram ligações químicas pelos seguintes livros: Princípios de Química - Atkins e Jones (E1, E6, E7 e E8); Química Inorgânica - Shriver e Atkins (E1 e E6); Química Inorgânica Não Tão Concisa - J. D. Lee (E6 e E8); Química: A Ciência Central – Brown *et al.*, (E6); Físico-Química I – Atkins e De Paula (E6). A pouca importância dada ao modelo quântico é coerente com apenas uma menção a um livro que aborda a ligação covalente segundo esse modelo (E6

– Atkins e De Paula – Físico-Química I). A carência de menções aos livros de Físico-Química e de Química Quântica sugere que pouco do que estudaram nessas obras durante a formação inicial ficou retido na memória. E isso pode contribuir para explicar o predomínio do modelo clássico sobre a ligação covalente por parte dos estudantes.

Todos os estudantes entrevistados citaram características dos modelos clássico e quântico da ligação covalente. Isso sugere que eles possuem um modelo híbrido no qual as características do modelo clássico são mais evidentes. Isso pode ser explicado pela formação inicial, que aborda tais modelos em diversas disciplinas. Porém, é necessária uma reflexão acerca dos modelos de ligação no sentido de distinguir os modelos e utilizá-los de acordo com nível de ensino. Convém, no Ensino Superior a ênfase no modelo quântico, pois fornece compreensões mais complexas e precisas sobre a ligação covalente (TOMA, 1997). O modelo clássico, se o professor optar por utilizá-lo, deve se limitar à Educação Básica, pois é menos complexo para os estudantes.

Quando solicitados a dar uma definição para a ligação covalente os estudantes citaram voluntariamente poucas características desse conceito, conforme pode ser observado no Quadro a seguir:

Quadro 7 – Características da ligação covalente citadas pelos estudantes nas entrevistas.

Estudante / Característica	E1	E2	E6	E7	E8
Compartilhamento de Elétrons	X	X	X	X	X
Sobreposição de orbitais	X	-	-	-	-
Estabilidade	-	-	X	-	X

Fonte: Própria.

No entanto, durante a entrevista surgiram outras características que serão discutidas a seguir.

O compartilhamento de elétrons foi citado por todos os estudantes, corroborando, com os dados do questionário, no qual foi a característica da ligação covalente mais citada pelos estudantes. Dos cinco entrevistados, apenas E1 utilizou unicamente o modelo quântico para explicar o compartilhamento de elétrons:

E1: *Compartilhar é a proximidade, o orbital ele não está preenchido totalmente, então quando compartilha o elétron de um outro átomo, ou seja, preenche esse orbital com um elétron de outro átomo seria esse o compartilhamento, na verdade, seria os orbitais compartilhando os elétrons existentes neles.*

Nas demais respostas percebe-se que o compartilhamento de elétrons é entendido segundo o conceito cotidiano de compartilhar (partilhar, repartir). Isso pode ser observado nas respostas a seguir:

E8: *Significa justamente não haver nem ganho nem perda, seria dividir, como sinônimo de compartilhar mesmo, dividir.*

E2: *Os elétrons pertencerem aos dois ao mesmo tempo.*

Na perspectiva histórico-cultural (Vigotski, 2009), esse conceito explicitado de compartilhamento de elétrons aproxima-se mais dos conceitos cotidianos, pois apresenta pouca relação com outros conceitos científicos. Contudo, os conceitos científicos apoiam-se nos conceitos cotidianos no curso de seu desenvolvimento. Dessa forma, a partir do conceito cotidiano de compartilhamento pode-se desenvolver o conceito científico de compartilhamento de elétrons.

Compartilhamento de elétrons é a principal característica da ligação covalente segundo os estudantes pesquisados. Porém, os dados deste estudo sugerem que essa característica é compreendida parcialmente pelos estudantes, que a consideram, na maioria das vezes, segundo o modelo clássico da ligação covalente. Se por uma parte é uma característica valorizada pelos estudantes, por outra é pouco compreendida. Esse dado corrobora com outras pesquisas sobre o ensino da ligação covalente (BIRK; KURTZ, 1999; BOO, 1998; NICOLL, 2001).

A estabilidade foi mencionada por todos os estudantes durante as entrevistas, porém, apenas E1 a explicou em termos da diminuição da energia do sistema:

E1: *Na ligação covalente seria um compartilhamento desses elétrons da última camada, enfim, em resumo, é uma ligação entre os átomos, quando os átomos se juntam para formar as moléculas e assim obter estabilidade, que é uma menor energia que eles não teriam acesso separados.*

Nessa resposta E1 explica que o motivo da estabilidade é a menor energia dos átomos após a formação da ligação covalente. Equivocadamente, E2 afirma o inverso disso: para esse estudante a formação da ligação aumenta a energia do sistema e isso resulta em estabilidade. Diferentemente, E8 justifica a estabilidade do ponto de vista eletrostático. Para E6 e E7 a estabilidade provém da formação do octeto de elétrons:

E7: *Nesse caso, a gente sabe que a regra do octeto não vale para todas as ligações e para todos os átomos, mas por via de regra de base, a gente sabe que oito elétrons numa camada, na última camada, a camada mais externa é que daria a estabilidade, então no caso da covalente, eles iriam compartilhar esses elétrons com o intuito de chegar nesse número ou num número que nesse caso não seja talvez o octeto, um número próximo a estabilidade deles.*

O modelo clássico da ligação covalente traz consigo a regra do octeto, muito utilizada pelos estudantes pesquisados. A maioria explica a formação da ligação covalente com base apenas nessa regra, em lugar dos aspectos energéticos. O uso da regra do octeto é criticado por ser falha em muitos casos e por dificultar a aprendizagem dos fatores energéticos que governam as ligações químicas. Segundo Fernandez e Marcondes (2006, p. 21):

Parece haver uma tendência generalizada no ensino de Química de atribuir a estabilidade das substâncias à formação do octeto eletrônico e que esta “crença” não é abalada facilmente nos alunos por evidências experimentais.

Os aspectos energéticos relacionados à ligação covalente são pouco compreendidos pelos estudantes. Provavelmente isso ocorre porque é necessário recorrer ao modelo quântico, pouco utilizado pelos estudantes. Nenhum dos

estudantes mencionou a estabilidade devido à diminuição da energia total do sistema, conforme estabelece a IUPAC (2019). No único livro de Físico-Química citado pelos estudantes, a estabilidade do sistema é creditada à elevada densidade eletrônica internuclear e ao emparelhamento de spins (ATKINS; DE PAULA, 2012). Porém, nenhuma dessas explicações foram fornecidas pelos estudantes.

Os estudantes pesquisados justificam a energia da ligação por meio de diferentes explicações. Apenas E6 recorre a uma característica do modelo quântico:

E6: *Acho que pode ser a direção do orbital molecular e como ele está se sobrepondo, acredito que existem direções nas quais esses orbitais eles vão se sobrepor que torna a ligação muito mais estável [...].*

Essa explicação está de acordo com Pauling (1960), que estabeleceu que a magnitude da sobreposição dos orbitais define a estabilidade do sistema e energia da ligação covalente. Para ele, a maior estabilidade do sistema confere maior força à ligação covalente, ou seja, é necessária mais energia para quebrar as ligações.

Os demais estudantes afirmam que a energia da ligação covalente vem dos orbitais (E1), dos elétrons (E2 e E8) ou da quantidade de elétrons que participam da ligação (E7). A energia de ressonância, que segundo Pauling (1960), dá a maior contribuição para a energia da ligação covalente não foi citada por nenhum estudante. Porém, essa explicação não é unanimidade na comunidade científica (HEITLER, 1956).

Todos os estudantes mencionaram o emparelhamento de spins, porém apenas E1 relacionou essa característica com a diminuição da energia e a estabilidade do sistema:

E1: *[...] o spin é a representação do elétron quando eles se aproximam, eles vão estar preenchendo um orbital que está necessitando desse preenchimento pra diminuir a energia e obter estabilidade.*

A explicação de E1 está parcialmente correta, porém é insuficiente. No modelo quântico, o emparelhamento de spins refere-se à combinação das funções de onda que torna o sistema mais estável. Segundo Heitler (1956), a combinação de funções de onda com spins opostos, ou simétrica, confere ao sistema o estado mais estável.

Os demais estudantes (E2, E6 e E7) apenas mencionaram que era necessário que spin estivesse emparelhado, mas não souberam explicar o motivo. E8 forneceu uma explicação alternativa para o emparelhamento de spins:

E8: *Seria justamente a geração do campo eletromagnético através da rotação que ajudaria na estabilização de ambos os núcleos, então formaria a nuvem eletrônica em si e conseqüentemente geraria uma maior estabilidade para os núcleos a partir desse jogo de aproximação do núcleo mais eletronegativo ou de ficar mais centralizado a fim de ficar equidistante dos núcleos que tem a mesma eletronegatividade.*

Essa explicação está em total desacordo com a comunidade científica, dentre outros aspectos, porque não é adequado representar o spin do elétron como uma rotação (PORTO; SILVA, 2016). Além disso, não há qualquer evidência que os spins eletrônicos contribuam para a estabilidade dos núcleos.

A sobreposição de orbitais foi mencionada por apenas três estudantes (E1, E6 e E8). Enquanto E6 não forneceu qualquer explicação, E1 e E8 mencionaram que a sobreposição de orbitais diminui a energia do sistema:

E1: *Então, eu acho que é justamente buscando essa diminuição da energia eles vão sobrepor esses orbitais pra poder diminuir a energia, a atração que vai ocorrer entre eles, a proximidade que vai ocorrer entre eles é essa.*

Nenhum estudante mencionou claramente o que entende por sobreposição de orbitais, apenas dois deles mencionaram a sua consequência para o sistema: a estabilidade por meio da diminuição da energia. Esse dado aponta para a necessidade de enfatizar o modelo quântico da ligação covalente no ensino, pois a

partir desses conhecimentos pode-se atingir um alto nível de compreensão da estrutura submicroscópica da matéria. Segundo Toma (1997, p. 9):

O modelo de Lewis é bastante útil na descrição qualitativa das ligações químicas. Porém, quando se quer discutir questões energéticas, geometrias ou aspectos de natureza espectroscópica, torna-se necessário lançar mão de teorias quânticas que enfocam a ligação química em termos da combinação de orbitais. Esse tipo de abordagem exige o ensino do modelo quântico para o átomo, e considera que quando dois átomos se ligam, o compartilhamento eletrônico se dá pela combinação dos orbitais que estão interagindo.

Dessa forma, concordamos com Toma (1997), que a aprendizagem do modelo quântico da ligação covalente permite a compreensão mais completa das ligações químicas em geral e de suas características.

Os dados das entrevistas concordam com os do questionário em relação à direção da ligação covalente. Nenhum dos estudantes relacionou a direção da ligação covalente com a orientação espacial dos orbitais de ligação. Dois estudantes (E2 e E8) justificam a direção por meio da eletronegatividade dos átomos:

E8: *A ligação seria direcionada devido a diferença de eletronegatividade entre os núcleos que estão ligados, então um núcleo mais eletronegativo teria maior capacidade de puxar o elétron para si, de atrair esse elétron para si, conseqüentemente isso geraria uma polarização na molécula, conseqüentemente geraria um momento polar, gerando uma molécula polar.*

Nessa resposta, novamente, observa-se a confusão entre direção da ligação e polaridade por parte dos estudantes. Os outros entrevistados explicaram a direção por meio de forças eletrostáticas (E6 e E7). Esse dado demonstra que os estudantes desconhecem os fatores que determinam a direção da ligação covalente. De acordo com modelo quântico, a direção da ligação covalente está relacionada à orientação dos orbitais sobrepostos dos átomos que participam da ligação (PAULING, 1960).

Os estudantes explicam o comprimento da ligação covalente por meio de duas características: raio atômico dos átomos (E1, E6 e E7) e eletronegatividade (E6 e

E8). No entanto, o comprimento de uma ligação covalente é determinado pela distância internuclear de equilíbrio (PAULING, 1960).

Todos os estudantes mencionaram ter estudado as teorias quânticas de ligação durante a formação inicial. Porém, eles afirmam que se lembram pouco do conceito de ligação covalente trabalhado dessas aulas:

E2: *Na universidade essa visão quântica era só cálculo, cálculo, cálculo, cálculo... então eu vou dizer a você, se for ver conceito em cima desse cálculo eu não entendo nenhum conceito de nada assim de ligação química, eu sei que explica um monte de coisa, mas assim eu não sei dizer a você qual é a explicação a química quântica me daria, até porque na maioria dos livros, até os do ensino médio, também não tem nada assim, na graduação dependendo do assunto, dependendo da disciplina que a gente está vendo a visão também é clássica, aí fica bem complicado dizer a você como seria nessa visão quântica.*

Esse tipo de resposta foi dado pelos demais estudantes. De uma forma geral, eles afirmaram que lembram pouco do modelo quântico. Provavelmente, o esquecimento progressivo do modelo quântico se dá pela falta de uso após a formação inicial por parte dos estudantes entrevistados. Quatro estudantes entrevistados trabalham como professores e rotineiramente abordam o modelo clássico da ligação covalente em suas aulas (E1, E2, E7 e E8). Esse contato constante com o modelo clássico pode ter influenciado as respostas fornecidas neste estudo. Mesmo assim, o modelo clássico é limitado em muitos aspectos, como visto anteriormente. O domínio do modelo quântico é necessário ao professor de Química, pois permite uma compreensão profunda da estrutura submicroscópica da matéria. Além disso, o modelo quântico é mais completo e explica de forma mais eficiente as características da ligação covalente que fazem parte do modelo clássico.

4.3.2 Análise das Soluções dos Problemas Propostos na Entrevista

Após responderem às questões relativas ao aprofundamento das respostas do questionário, os estudantes responderam a três problemas. A resolução dessas questões exigia o emprego do conceito de ligação covalente e suas características. Tomando como base a definição de Lopes (1994), essas questões podem ser consideradas problemas, pois: 1)- possuem obstáculos, isto é, dispositivos que não permitem a resolução imediata e automática; 2)- apresentam relevância para os estudantes, pois estão inseridas num contexto de autoconhecimento em relação à conceitos aprendidos durante a formação inicial; 3)- são motivadoras, tendo em vista que, todos os estudantes se empenharam em resolvê-las. O emprego desses problemas nas entrevistas se deu em função da teoria de Vigotski (2009, p. 156) sobre a formação e o desenvolvimento de conceitos cotidianos e científicos:

[...] a formação de conceitos é um processo de caráter produtivo e não reprodutivo, que um conceito surge e se configura no curso de uma operação complexa voltada para a solução de algum problema, e que só a presença de condições externas e o estabelecimento mecânico de uma ligação entre a palavra e o objeto não são suficientes para a criação de um conceito.

As três questões apresentam casos específicos de ligações covalentes para dar maior concretude a esse conceito científico. A resolução das questões propostas na entrevista pode fornecer informações sobre o conceito de ligação covalente dos estudantes.

Na primeira questão, pediu-se que os estudantes explicassem a formação da molécula de Nitrogênio (N_2) a partir de dois átomos de Nitrogênio (N). O Quadro 8, que se encontra a seguir, apresenta as características do conceito de ligação covalente citadas voluntariamente nas respostas à primeira questão:

Quadro 8 – Características da ligação covalente citadas voluntariamente pelos estudantes na primeira questão da entrevista.

Estudante / Característica	E1	E2	E6	E7	E8
Compartilhamento de Elétrons	X	-	X	X	-
Estabilidade do Sistema	X	-	X	X	-
Multiplicidade da Ligação	X	-	X	-	-
Polaridade da Ligação	-	-	X	-	-
Sobreposição de Orbitais	X	-	X	-	-
Emparelhamento de Spins	-	-	-	-	X
Comprimento da Ligação	-	-	X	-	-
Energia da Ligação	-	-	-	-	-

Fonte: Própria.

Assim como no questionário, o compartilhamento de elétrons e a estabilidade foram as características mais citadas. Foram citadas duas características do modelo quântico da ligação covalente: sobreposição de orbitais e emparelhamento de spins. Pelo visto, os resultados das análises das entrevistas corroboram parcialmente os obtidos por meio do questionário, tendo em vista que, geralmente, os estudantes pesquisados preferem explicar o conceito de ligação covalente por meio de uma mistura dos modelos clássicos e quânticos (modelo híbrido), no qual predominam conceitos clássicos. Veja-se o exemplo de E6 que cita a sobreposição de orbitais ao mesmo tempo em que justifica a estabilidade do sistema por meio da regra do octeto:

E6: [...] essa aproximação [entre dois átomos de Nitrogênio] faz com que haja sobreposição desses núcleos desses orbitais eletrônicos, inicialmente a ligação, a simples, a dupla e a tripla, são formadas a partir dessa sobreposição dessas nuvens eletrônicas que a gente chama, quanticamente falando é *sp*, nitrogênio, no caso, *p*, *sp*. E aí a estabilização, a questão vem da teoria do octeto, porque eles são estáveis com oito elétrons na camada de valência.

E2 não conseguiu responder a essa questão. De uma forma geral, todas as demais respostas sugerem um modelo híbrido, pois citaram características dos modelos clássico e quântico. Além da sobreposição de orbitais (E1 e E6) e do emparelhamento de spins (E8), três estudantes (E6, E7 e E8) citaram o termo

“orbital” em suas respostas, ressaltando que a formação da ligação covalente se dá quando eles estão semipreenchidos. Segundo Joki e Aksela (2018), ligação química é um tópico desafiador no ensino de Química e tal desafio precisa ser respondido por meio da teoria quântica, pois o modelo clássico não fornece uma explicação completa. Para isso, existem disciplinas na formação inicial que abordam o modelo quântico da ligação covalente. O modelo quântico da ligação covalente está inserido no currículo dos estudantes pesquisados nas seguintes disciplinas: Química Orgânica LI, Química Inorgânica LI e Físico-Química LI. Apesar disso, percebe-se que eles aprenderam apenas parcialmente o modelo quântico.

Na segunda questão os estudantes precisavam explicar uma tabela que apresentava dados de comprimento de ligação e energia de ligação de ácidos halogenídricos (HF, HCl, HBr e HI). Todos os estudantes interpretaram os dados e reconheceram que o comprimento da ligação diminui à medida que a energia de ligação aumenta. Dois estudantes não souberam explicar essa regularidade (E2 e E8), enquanto que outros três (E1, E6 e E7) citaram o raio como causa para isso:

E1: *Aqui eu acho que o comprimento é pelo tamanho do raio mesmo, o iodo ele é maior do que o flúor, por exemplo, então a atração mesmo entre eles vai ser muito maior. Porque o flúor, por ter menor raio, vai atrair, então eles vão determinar o raio atômico mesmo da própria ligação deles. Esse daqui é menor do que esse e eu acho que é isso que vai seguindo, pelo menos pelo comprimento é isso, pelo tamanho do halogênio aí o raio atômico do halogênio é isso que está definindo, eu acredito. E a energia, porque a energia de ligação quanto menor o raio maior a energia de ligação por que está mais próximo do núcleo, então a atração do elétron vai ser muito maior, logo a energia, acredito que seja essa.*

Nenhum estudante utilizou características do modelo quântico para explicar essa questão. Segundo Pauling (1960), a ligação H-F é mais forte porque é formada por contribuições aproximadamente iguais dos híbridos de ressonância covalente (H:F) e iônico (H⁺F⁻). Nos demais ácidos halogenídricos (HCl, HBr e HI) o híbrido de ressonância iônico contribui cada vez menos para a estrutura. A estabilização devido

à energia de ressonância torna o sistema mais estável, diminui o comprimento da ligação e aumenta a energia de dissociação da ligação.

A terceira questão contava com uma figura mostrando os orbitais tetraédricos da molécula de água (H_2O) e pedia que os alunos a explicassem a partir de seus conhecimentos sobre as ligações covalentes. Na resolução dessa questão, todos os estudantes mencionaram os orbitais, mas apenas três (E1, E6 e E8) empregaram o termo “sobreposição”. Além dos orbitais todos fizeram referência à teoria da Repulsão dos Pares Eletrônicos da Camada de valência (RPECV). Nenhum dos estudantes mencionou a hibridização dos orbitais do átomo de Oxigênio. Encontra-se a seguir a resposta fornecida por E2:

E2: *Eu vejo o oxigênio, a gente vê como se fossem quatro ligações, o oxigênio ele tem aqueles elétrons sobrando, como na quântica a gente vê como se fosse um formato do orbital, aí ele ia ficar como se fosse uma nuvem e aqui ele pode fazer qualquer outra ligação nesses elétrons aí que estão sobrando, aqui já foi meio que ocupado com hidrogênio, mas é o que eu vejo.*

De uma forma geral, observa-se nas respostas que os estudantes explicam a geometria e a formação das ligações covalentes na molécula de água adequadamente por meio do modelo clássico, empregando o compartilhamento de elétrons e a teoria RPECV. Do ponto de vista quântico, apenas os orbitais foram citados, talvez por estarem explícitos na figura. As respostas mostraram que os estudantes não conseguiram articular a figura com o modelo quântico da ligação covalente.

Em resumo, a análise das questões mostrou que os estudantes conhecem bem o modelo clássico da ligação covalente e relacionam algumas de suas características. A resolução das questões permitiu que os estudantes mobilizassem seus conhecimentos sobre a ligação covalente e o resultado disso foi a explicitação de um sistema conceitual híbrido no qual predomina o modelo clássico da ligação covalente. As respostas ainda sugerem que os estudantes não distinguem características clássicas e quânticas e as empregam indistintamente na resolução dos problemas propostos.

Os dados obtidos por meio do questionário e das entrevistas corroboram com os da literatura, visto que, as características do conceito de ligação covalente mais citadas pelos estudantes são também as mais citadas nas pesquisas em ensino. Da mesma forma, o modelo clássico é preferido pelos estudantes assim como pelos pesquisadores, que centram seus estudos nas teorias mais simples sobre a ligação covalente. Os resultados desta pesquisa apontam para a necessidade de ênfase no modelo quântico no ensino de Química e nas pesquisas em ensino.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados obtidos na pesquisa possibilitam compreender como licenciandos em Química conceituam ligação covalente e empregam este conceito na resolução de problemas químicos.

O sistema conceitual de ligação covalente identificado a partir da explicitação dos estudantes por meio de questionário e entrevista apresenta características do modelo clássico e do modelo quântico, com predominância de conceitos do primeiro. O modelo clássico prevaleceu sobre o modelo quântico, provavelmente, por alguns motivos: (1)- é o primeiro modelo aprendido pelos estudantes, vem do Ensino Médio e é reforçado em disciplinas de Química Geral, daí sua resistência à mudança; (2)- é ensinado pelos estudantes na graduação, enquanto estagiários e, após formados, como professores da Educação Básica; (3)- é puramente qualitativo, diferentemente do modelo quântico, que é permeado pelo formalismo matemático, o que requer conhecimentos mais avançados por parte dos estudantes.

Comparando as características da ligação covalente que compõem o mapa conceitual elaborado nesta pesquisa com as respostas dos estudantes, percebeu-se que o sistema conceitual deles é limitado a poucos conceitos: compartilhamento de elétrons, sobreposição de orbitais e estabilidade, com eventuais citações acerca de outras características, incluindo-se concepções alternativas e equivocadas. Resultam poucas relações conceituais e um sistema conceitual pobre. Isso sugere que os estudantes aprenderam o conceito de ligação covalente de forma parcial. Do ponto de vista histórico-cultural, a aprendizagem completa do conceito científico requer um sistema conceitual abundante em conceitos e em relações entre eles.

Apesar dessa limitação, o sistema conceitual híbrido apresentado pelos estudantes mostra-se coerente com o que se pratica no nível de ensino em que eles lecionam. Contudo, a aprendizagem do modelo quântico poderia ser útil, pois explica de forma mais eficiente a ligação química e a estrutura submicroscópica da matéria. De posse desses conhecimentos, os professores poderão minimizar alguns problemas oriundos do modelo clássico, tais como o uso generalizado da regra do octeto e algumas concepções alternativas.

Na resolução das questões propostas nas entrevistas, os estudantes demonstraram mais uma vez as limitações identificadas anteriormente no questionário. Eles mostraram, diante de ligações covalentes específicas, que seu sistema conceitual é limitado a poucas características do modelo clássico. Isso pode ser interpretado como uma dificuldade peculiar dos conceitos científicos, pois eles se referem aos itens de uma forma geral, ou seja, são pouco específicos / abstratos. Porém, o curso do desenvolvimento dos conceitos científicos dirige-se a casos específicos / concretos. Dessa forma, o sistema conceitual dos estudantes, identificado neste estudo, pode ser considerado preparado para ações de formação continuada visando o desenvolvimento de um sistema conceitual mais completo para o conceito de ligação covalente.

Os resultados apontam para a necessidade de melhorar o ensino da ligação covalente na formação inicial dos professores de Química. Um ponto que nos parece crucial é a articulação das disciplinas que trabalham com o conceito. O fato de que os estudantes chegam ao final do curso com conhecimentos rasos sugere que não lhes foi exigida profundidade conceitual no percurso formativo. Esse problema de formação é complexo e só pode ser atacado pelos professores formadores em conjunto e requer uma investigação voltada para o currículo da Licenciatura em Química.

De modo mais específico, cremos ser importante investigar o ensino de cada característica da ligação covalente, no sentido de identificar mais claramente as dificuldades que os estudantes apresentam ao estudá-las, inclusive, verificando se as hipóteses levantadas nessa tese se sustentam.

Outro ponto a ser trabalhado é o material didático utilizado pelos estudantes, o qual não esclarece suficientemente os conceitos, as relações entre os modelos clássico e quântico, nem fazem uma boa relação entre os aspectos qualitativo e quantitativo da ligação química. A produção de materiais que venham a esclarecer o sistema conceitual da ligação covalente surge, assim como uma necessidade.

Portanto, ao concluirmos esta tese, vislumbramos a abertura de um campo de pesquisas que dará continuidade ao nosso trabalho de pesquisador do Ensino de Química.

Esta tese mostrou-se original, pois segundo a análise da literatura da área de Ensino de Química realizada em periódicos nacionais e internacionais e em dissertações e teses nacionais, não existem outros estudos que abordam a conceituação da ligação covalente por meio da teoria da formação dos conceitos cotidianos e científicos de Vigotski. Na realidade, este é um dos primeiros trabalhos sob esta perspectiva teórica no ensino de Química no Brasil. Em virtude disso, os instrumentos de coleta e a análise de dados tendem a se aperfeiçoar com o tempo. No entanto, os instrumentos de coleta e análise dos dados realizada mostraram-se eficientes, pois revelou o sistema conceitual expresso pelos estudantes.

O conceito de ligação covalente mostrou-se complexo, tendo em vista que, pode ser abordado por meio dos modelos clássico e quântico ou ainda por meio de um modelo híbrido, o que é mais comum. Isso ocorre porque mesmo na perspectiva clássica há a mistura entre as características de ambos os modelos. Isso pode ser exemplificado pelo emparelhamento de spins, uma característica exclusiva do modelo quântico que é introduzida comumente no ensino do modelo clássico. Nesse sentido, recomenda-se que os professores possam refletir sobre esses modelos e ensiná-los de forma que os estudantes conheçam as distinções entre ambos. Adicionalmente, recomenda-se ainda a ênfase no Ensino Superior do modelo quântico, pois é capaz de explicar a ligação covalente de forma mais sofisticada e coerente do que o modelo clássico.

REFERÊNCIAS

- ABEGG, R. Versuch einer Theorie der Valenz und der Molekularverbindungen. **Christiania Videnskabs-Selskabets Skrifter**, v. 12, p. 1-30, 1902.
- ABEGG, R. Die Valenz und das periodische System. Versuch einer Theorie der Molekularverbindungen. **Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie**, v. 39, n. 1, p. 330-380, 1904.
- ACCORINTI, H. L.; GONZÁLEZ, J. C. M. Modelos y Representación. **Epistemología e Historia de la Ciencia**, v. 1, n. 1, p. 21-34, 2016.
- ALMEIDA, L. T. G.; AYALA, J. D.; QUADROS, A. L. As Videoaulas em Foco: Que Contribuições Podem Oferecer para a Aprendizagem de Ligações Químicas de Estudantes da Educação Básica? **Química Nova na Escola**, v. 40, n. 4, p. 287-296, 2018.
- ATKINS, P. W.; DE PAULA, J. **Físico-Química, Volume I**. 9. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.
- ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente**. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- AWAN, A. S.; KHAN, T. M. Investigating Pakistani Students' Alternative Ideas Regarding the Concept of Chemical Bonding. **Bulletin of Education and Research**, v. 35, n. 1, p. 17-29, 2013.
- BANTZ, D. A. The Structure of Discovery: Evolution of Structural Accounts of Chemical Bonding. *In*: NICKLES, T. (Ed.). **Scientific Discovery: Case Studies**. 1. ed. Dordrecht, Holand: D. Reidel Publishig Company, 1980. cap. 15, p. 291-329.
- BARRETO, U. R. **Discussão Filosófica Acerca dos Modelos de Ligação Química**. 2016. Dissertação (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências) - Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia / Universidade Estadual de Feira de Santana, 2016.
- BELLAS, R. R. D.; GONZALEZ, I. M.; SILVA, J. L. P. B. Mapas Conceituais em Perspectiva Histórico-Cultural. *In*: ENCONTRO NACIONAL DE PESQUISA EM EDUCAÇÃO EM CIÊNCIAS, 10., 2015, Águas de Lindóia. **Anais [...]** Rio de Janeiro: ABRAPEC, 2015. p.1-8.
- BERGQVIST, A., DRECHSLER, M.; RUNDGREN, S. C. Upper Secondary Teachers' Knowledge for Teaching Chemical Bonding Models. **International Journal of Science Education**, v. 38, n. 2, p. 298-318, 2016.
- BERGQVIST, A.; DRECHSLER, M.; DE JONG, O.; RUNDGREN, S. C. Representations of Chemical Bonding Models in School Textbooks – Help or Hindrance for Understanding? **Chemistry Education Research and Practice**, v.14, p. 589-606, 2013.

BERGQVIST, A.; RUNDGREN, S. C. The Influence of Textbooks on Teachers' Knowledge of Chemical Bonding Representations Relative to Students' Difficulties Understanding. **Research in Science & Technological Education**, v. 35, n. 2, p. 215-237, 2017.

BIRK, J. P.; KURTZ, M. J. Effect of Experience on Retention and Elimination of Misconceptions about Molecular Structure and Bonding. **Journal of Chemical Education**, v. 76, n. 1, p. 124-128, 1999.

BOGDAN, R.; BIKLEN, S. **Investigação Qualitativa em Educação: Uma Introdução à Teoria e aos Métodos**. 1. ed. Porto: Porto Editora, 1994.

BOO, H. K. Students' Understandings of Chemical Bonds and the Energetics of Chemical Reactions. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 35, n. 5, p. 569-581, 1998.

BOO, H. K. Pre-Service Teachers' Content Weaknesses Concerning Chemical Bonds and Bonding. *In*: CHIA, L. S.; BOO, H. K. (Eds.) **Chemistry Teachers' Network: A Source Book for Chemistry Teachers**. 1. ed. Singapore: Singapore National Institute of Chemistry, 2000.

BOUAYAD, A.; KADDARI, F.; LACHKAR, M.; ELACHQAR, A. Quantum Model of Chemical Bonding: Barriers and Learning Difficulties. **Procedia - Social and Behavioral Sciences**, v. 116, n. 21, p. 4612-4616, 2014.

BRAY, W. C.; BRANCH, G. E. K. Valence and Tautomerism. **Journal of the American Chemical Society**, v. 35, n. 10, p. 1440-1447, 1913.

BROWN, T. L.; LEMAY JR, H. E.; BURSTEN, B. E.; MURPHY, C. J.; WOODWARD, P. M.; STOLTZFUS, M. W. **Química: A Ciência Central**. 13. ed. São Paulo: Pearson Educacional do Brasil, 2016.

BRUICE, P. Y. **Química Orgânica, Volume I**. 4. Ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.

BURROWS, N. L.; MOORING, S. R. Using Concept Mapping to Uncover Students' Knowledge Structures of Chemical Bonding Concepts. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 16, p. 53-66, 2015.

CASTRO, A. I. L. S.; PADILLA, K. El Conocimiento Pedagógico del Contenido y la Enseñanza del Enlace Químico em el Bachillerato. **Enseñanza de las Ciencias**, v. Extra, p. 177-182, 2017.

CHAYUT, M. J. J. Thomson: The Discovery of the Electron and the Chemists. **Annals of Science**, v. 48, n. 6, p. 527-544, 1991.

CLEMENTE, M. P. D. F. **Análise das Avaliações Realizadas na Disciplina de Arquitetura Atômica e Molecular no Curso de Química, Modalidade a Distância da UFRN**. Dissertação (Mestrado em Química) - Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2013.

COHEN, I.; BEN-ZVI, R. Improving Student Achievement in the Topic of Chemical Energy by Implementing New Learning Materials and Strategies. **International Journal of Science Education**, v. 14, n. 2, p. 147-156, 1992.

CONSTANTINO, M. G. **Química Orgânica, Volume I**. 1. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2008.

COSTU, B.; NIAZ, M. Presentation of Origin of the Covalent Bond in Turkish General Chemistry Textbooks: A History and Philosophy of Science Perspective. **Educación Química**, v. 23, n. 2, p. 1-8, p, 2012.

COULSON, C. A. **Valence**. 2. ed. Londres: Oxford University Press, 1961.

CROFT, M.; BERG, K. From Common Sense Concepts to Scientifically Conditioned Concepts of Chemical Bonding: An Historical and Textbook Approach Designed to Address Learning and Teaching Issues at the Secondary School Level. **Science & Education**, v. 23, n. 9, p. 1733-1761, 2014.

CRUJEIRAS-PÉREZ, B. Análisis de las Estrategias de Apoyo Elaboradas por Futuros Docentes de Educación Secundaria para guiar al Alumnado en la Indagación. **Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias**, v. 14, n. 2, p. 473-486, 2017.

DHINDSA, H. S.; TREAGUST, D. F. Prospective Pedagogy for Teaching Chemical Bonding for Smart and Sustainable Learning. **Chemistry Education Research and Practice**, v.15, p. 435-446, 2014.

DICKS, A. P. Shake For Sigma, Pray For Pi: Classroom Orbital Overlap Analogies. **Journal of Chemical Education**, v. 88, n. 4, p. 426-427, 2011.

DRUDE, P. Zur Elektronentheorie der Metalle. **Annalen der Physik**, v. 306, p. 566-613, 1900.

DUARTE, H. A. Ligações Químicas: Ligação Iônica, Covalente e Metálica. **Química Nova na Escola**. Cadernos Temáticos da Química Nova na Escola, n. 4, p. 14-23, 2001.

ERMAN, E. Factors Contributing to Students' Misconceptions in Learning Covalent Bonds. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 54, n. 4, p. 520-537, 2017.

ESPANHOL, E. **As Concepções dos Alunos do Ensino Médio Sobre o Conteúdo de Ligações Químicas: Uma Análise nos Livros Didáticos Através da Prática Educacional do SESI/PR**. Dissertação (Mestrado em Formação Científica, Educacional e Tecnológica) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2017.

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

FABRI, P. H. **Estudo da Motivação do Estudante Trabalhando com Modelos Moleculares Concretos, Validada por meio de Vídeo e Áudio**. Dissertação (Mestrado em Ciências Naturais) - Centro de Ciência e Tecnologia, Universidade estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, 2016.

FERNANDES, L. S.; CAMPOS, A. F. A Abordagem de Ligação Química numa Perspectiva de Ensino por Situação-Problema. **Enseñanza de las Ciencias**, v. Extra, p. 3211-3215, 2013.

FERNANDES, L. S.; CAMPOS, A. F. Elaboração e Aplicação de uma Intervenção Didática Utilizando Situação-Problema no Ensino de Ligação Química. **Experiências em Ensino de Ciências**, v.9, n. 1, p. 37-49, 2014.

FERNANDES, L. S.; CAMPOS, A. F.; MARCELINO-JR, C. A. C. Concepções Alternativas dos Estudantes Sobre Ligação Química. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 5, n. 3, p. 19-27, 2010.

FERNANDEZ, C.; MARCONDES, M. E. R. Concepções dos Estudantes sobre Ligação Química. **Química Nova na Escola**, v. 24, n. 2, p. 20-24, 2006.

FERREIRA, A. B. H. **Novo Aurélio Século XXI: O Dicionário da Língua Portuguesa**. 3. ed. Rio de Janeiro: Nova Fronteira, 1999.

FONSECA, K. B. **Elaboração de uma Unidade Didática Utilizando Modelos e Analogias na Abordagem de Conteúdos Relacionados ao Conteúdo de Estados Físicos da Matéria e Ligações Químicas**. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências Naturais e Matemática) - Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2016.

FRANCO-MARISCAL, R.; MARTÍNEZ, J. M. O. Estudio de la Tipología de Preguntas Sobre las Temáticas Átomo, Tabla Periódica y Enlace Químico en las Pruebas de Acceso a la Universidad en Andalucía. **Enseñanza de las Ciencias**, v. Extra, p. 4003-4008, 2017.

FRANCO, A. G.; RUIZ, A. G. Desarrollo de una Unidad Didáctica: El Estudio del Enlace Químico en el Bachillerato. **Enseñanza de las Ciencias**, v. 24, n. 1. p. 111-124, 2006.

FREITAS FILHO, J. R.; SILVA, S. P.; SOUZA, C. L. S.; FREITAS, L. P. S. R.; FREITAS, J. C. R.; FREITAS, J. J. R. Ligações Químicas em Livros Didáticos de Química: Uma Análise dos Elementos dos Gêneros de Discurso. **Educación Química**, v. 28, 282-294, 2017.

GIL, A. C. **Como Elaborar Projetos de Pesquisa**. 4. ed. São Paulo: Atlas, 2002.

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

GONZÁLEZ-FELIPE, M. E.; AGUIRRE-PÉREZ, C.; CORTES-SIMARRO, J. M.; CEZAR, R. F.; MONILÍ, A. M. V. Estudio del Tratamiento del Enlace Químico en los Libros de Texto Españoles. **Revista Electrónica de Investigación Educativa**, v. 19, n. 3, p. 60-70, 2017.

GONZÁLEZ-FELIPE, M. E.; AGUIRRE-PÉREZ, C.; TOLEDANO, R. M.; CEZAR, R. F.; VÁQUEZ-MOLINÍ, A. Diseño e Implementación de una Propuesta Didáctica Plurimetodológica para Introducir el Enlace Químico en 3º Curso de Educación Secundaria Obligatoria (E.S.O). **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 18, n. 1, p. 40-55, 2019.

GUIMARÃES, C. C. **Ligação Química: Do Saber Sábio ao Livro Didático**. Dissertação (Mestrado em Ensino, Filosofia e História das Ciências) - Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Universidade Estadual de Feira de Santana, 2009.

HAPKIEWICZ, A. Clarifying Chemical Bond: Overcoming our Misconceptions. **The Science Teacher**, v. 58, n. 3, p. 24-27, 1991.

HARDY-VALLÉE, B. **Que é um Conceito?** 1. ed. São Paulo: Parábola, 2013.

HARGITTAI, I.; CHAMBERLAND, B. The VSEPR Model of Molecular Geometry. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 12B, n. 3 / 4, p. 1021-1038, 1986.

HAYNES, W. M. **Handbook of Chemistry and Physics**. 97 Ed. New York: CRC Press, 2017.

HEITLER, W. **Elementary Wave Mechanics**: with Applications to Quantum Chemistry. 2. ed. Oxford: Clarendon Press, 1956.

HEITLER, W.; LONDON, F. Wechselwirkung neutraler Atome und Homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik. **Zeitschrift für Physik**, v. 44, n. 6, 7, p. 455-472, 1927.

HILTON, A.; NICHOLS, K. Representational Classroom Practices that Contribute to Students' Conceptual and Representational Understanding of Chemical Bonding. **International Journal of Science Education**, v. 33, n.16, p. 2215-2246, 2011.

HOUAISS, A.; VILLAR, M. S. **Dicionário Houaiss da Língua Portuguesa**. 1. ed. Rio de Janeiro: Objetiva, 2001.

International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). **Compendium of Chemical Terminology**. 2. ed. Estados Unidos da América, 2019. Disponível em: <https://goldbook.iupac.org/>. Acesso em: 09 out. 2019.

JENSEN, W. B. The Quantification of Electronegativity: Some Precursors. **Journal of Chemical Education**, v. 89, n. 1, p. 94-96, 2012.

JOKI, J.; AKSELA, M. The Challenges of Learning and Teaching Chemical Bonding at Different School Levels Using Electrostatic Interactions Instead of the Octet Rule as a Teaching Model. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 19, p. 932-953, 2018.

JOKI, J.; LAVONEN, J.; JUUTI, K.; AKSELA, M. Coulombic Interaction in Finnish Middle School Chemistry: A Systemic Perspective on Students' Conceptual Structure of Chemical Bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 16, p. 901-917, 2015.

KARACOP, A.; DOYMUS, K. Effects of Jigsaw Cooperative Learning and Animation Techniques on Students' Understanding of Chemical Bonding and Their Conceptions of the Particulate Nature of Matter. **Journal of Science Education and Technology**, v. 22, n. 2, p. 186-203, 2013.

KORDIAK, J. **Aplicação de Programas Computacionais do Método de Hückel Simples para o Ensino das Ligações Químicas**. Dissertação (Mestrado em Química Aplicada) - Universidade Estadual de Ponta Grossa, 2017.

KOSCIANSKI, P. V. A Química na Junk Food: **Uma Proposta para o Ensino de Ligações Químicas por meio do Enfoque CTS**. Dissertação (Mestrado Profissional em Ensino de Ciência e Tecnologia) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2013.

KOSSEL, W. Über Molekülbildung als Frage des Atombaus. **Annalen der Physik**, v. 354, n.3, p. 229-362, 1916.

LANGMUIR, I. The Arrangement of Electrons in Atoms and Molecules. **Journal of the American Chemical Society**, v. 41, n. 6, p. 868-934, 1919.

LANGMUIR, I. Types of Valence. **Science**, v. 54, n. 1386, p. 59-67, 1921.

LAZO, L.; ZÚÑIGA, N. Estudio Sobre las Concepciones Alternativas de Enlace Químico en Alumnos de Enseñanza Media y Enseñanza Universitaria. **Enseñanza de las Ciencias**, v. Extra, p. 1870-1876, 2013.

LEITE, B. S. **Uso das Tecnologias para o Ensino de Ciências: A Web 2.0 como Ferramenta de Aprendizagem**. Dissertação (Mestrado em Ensino das Ciências) - Departamento de Educação, Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2011.

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

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

LEWIS, G. N. **Valence and the Structures of Atoms and Molecules**. 1. ed. New York: The Chemical Catalog Company, 1923a.

LEWIS, G. N. Introductory Address: Valence and the Electron. **Transactions Faraday Society**, v. 19, p. 452-458, 1923b.

LEWIS, G. N. Acids and Bases. **Journal of the Franklin Institute**, v. 226, n. 3, p. 293-313, 1938.

LIMA, F. S. C. **Formação Docente sobre os Conceitos de Ligações Iônicas e o Desenvolvimento de uma Metodologia de Aprendizagem por Resolução de Situações-Problema**. Dissertação (Mestrado em Química) - Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

LIMA, F. S. C.; ARENAS, L. T.; PASSOS, C. G. A Metodologia de Resolução de Problemas: Uma Experiência para o Estudo das Ligações Químicas. **Química Nova**, v. 41, n. 4, p. 468-475, 2018.

LIMA, E. F. S.; SANTOS, M. G.; OLIVEIRA, G. M.; VAZ, W. F.; CARVALHO, F. O. Células Solares: Uma Abordagem Experimental no Ensino de Estrutura Atômica e Ligações Químicas. **Experiências em Ensino de Ciências**, v. 12, n. 1, p. 66-79, 2017.

LOPES, J. B. **Resolução de Problemas em Física e Química: Modelo para Estratégias de Ensino-Aprendizagem**. 1. ed. Lisboa: Texto Editora, 1994.

LORENTZ, H. A. **The Theory of Electrons and its Applications to the Phenomena of Light and Radiant Heat**. New York: G. E. Stechert, Leipzig: B. G. Teubner, 1916.

LÜDKE, M.; ANDRÉ, M. E. D. A. **Pesquisa em Educação: Abordagens Qualitativas**. 2. ed. Rio de Janeiro: E.P.U., 2014.

LUO, Y. **Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies**. New York: CRC Press, 2007.

LUXFORD, C. J.; BRETZ, S. L. Moving Beyond Definitions: What Student-Generated Models Reveal About Their Understanding of Covalent Bonding and Ionic Bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 14, p. 214-222, 2013.

LUXFORD, C. J.; BRETZ, S. L. Development of the Bonding Representations Inventory To Identify Student Misconceptions about Covalent and Ionic Bonding Representations. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 3, p. 312-320, 2014.

MARQUES, D. A. **Estudo do Desenvolvimento de Modelos Mentais Sobre o Conceito de Ligações Químicas e sua Relação com Obstáculos Epistemológicos**. Dissertação (Mestrado em Química) - Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amazonas, 2015.

MATUS, L.; BENARROCH, A.; NAPPA, N. La Modelización del Enlace Químico en Libros de Texto de Distintos Niveles Educativos. **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 10, n. 1, p. 178-201, 2011.

- MEDEIROS, C. E. **Uma Proposta para o Ensino de Química em Busca da Superação dos Obstáculos Epistemológicos**. Dissertação (Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática) - Faculdade de Educação, Universidade Federal de Pelotas, 2014.
- MENDONÇA, M. F. C. **Diagrama V Modificado como Instrumento Avaliativo da Aprendizagem de Alunos de um Curso de Licenciatura em Química**. Dissertação (Mestrado em Química Inorgânica) - Universidade Federal de Alfenas, 2014.
- MENDONÇA, P. C. C. **Influência de Atividades de Modelagem na Qualidade dos Argumentos de Estudantes de Química do Ensino Médio**. Tese (Doutorado em Educação) - Faculdade de Educação, Universidade Federal de Minas Gerais, 2011.
- MCQUARRIE, D. A. **Quantum Chemistry**. 2. ed. Mill Valley, California: University Science Books, 2008.
- MORTIMER, E. F.; MOL, G.; DUARTE, L. P. Regra do Octeto e Teoria da Ligação Química no Ensino Médio: Dogma ou Ciência? **Química Nova**, v. 17, n. 2, p. 243-252, 1994.
- MINGOS, D. M. P. **The Chemical Bond I: 100 Years Old and Getting Stronger**. Switzerland: Springer, 2016.
- NAHUM, T. L.; MAMLOK-NAAMAN, R.; HOFSTEIN, A.; KRONIK, L. A New "Bottom-Up" Framework for Teaching Chemical Bonding. **Journal of Chemical Education**, v. 85, n. 12, p. 1680-1685, 2008.
- NAHUM, T. L.; MAMLOK-NAAMAN, R.; HOFSTEIN, A.; TABER, K. S. Teaching and Learning the Concept of Chemical Bonding. **Studies in Science Education**, v. 46, n. 2, p. 179-207, 2010.
- NICOLL, G. A Report of Undergraduates' Bonding Misconceptions. **International Journal of Science Education**, v. 23, n. 7, p. 707-730, 2001.
- NIMMERMARK, A.; ÖHRSTRÖM, L.; MARTENSSON, J.; DAVIDOWITZ, B. Teaching of Chemical Bonding: A Study of Swedish and South African Students' Conceptions of Bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 17, p. 985-1005, 2016.
- ÖZMEN, H. Some Student Misconceptions in Chemistry: A Literature Review of Chemical Bonding. **Journal of Science Education and Technology**, v. 13, n. 2, p. 147-159, 2004.
- PAPPA, E. T.; TSARPALIS, G. Evaluation of questions in general chemistry textbooks According to the Form of the Questions and the Question-Answer Relationship (QAR): The Case of Intra - and Intermolecular Chemical Bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 11, p. 262-270, 2011.

PARIZ, E. **Ligação Metálica: Uma Proposta de Material Didático de Apoio ao professor em Sala de Aula**. Dissertação (Mestrado Profissional em Ensino de Ciências) - Universidade de Brasília, 2011.

PATRON, E.; WIKMAN, S.; EDFORS, I.; JOHANSSON-CEDERBLAD, B.; LINDER, C. Teachers' Reasoning: Classroom Visual Representational Practices in the Context of Introductory Chemical Bonding. **Science Studies and Science Education**, v. 101, v. 6, p. 887-906, 2017.

PAULING, L. The Application of the Quantum Mechanics to the Structure of the Hydrogen Molecule and Hydrogen Molecule-Ion and to Related Problems. **Chemical Reviews**, v. 5, n. 2, p. 173-213, 1928a.

PAULING, L. The Shared-Electron Chemical Bond. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 14, n. 4, p. 359-362, 1928b.

PAULING, L. The Nature of The Chemical Bond. Application of Results Obtained from the Quantum Mechanics and from a Theory of Paramagnetic Susceptibility to the Structure of Molecules. **Journal of the American Chemical Society**, v. 53, n. 4, p. 1367-1400, 1931.

PAULING, L. The nature of the Chemical Bond. IV. The Energy of Single Bonds and the Relative Electronegativity of Atoms. **Journal of the American Chemical Society**, v. 54, n. 9, p. 3570-3582, 1932a.

PAULING, L. The Nature of the Chemical Bond. III. The Transition from one Extreme Bond Type to Another. **Journal of the American Chemical Society**, v. 54, n. 3, p. 988-1003, 1932b.

PAULING, L. The Significance of Resonance to the Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules. *In*: GILMAN, H. **Organic Chemistry: An Advanced Treatise**, Vol. II. New York: John Wiley & Sons, 1938.

PAULING, L. **The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry**. 3. ed. Ithaca: Cornell University Press, 1960.

PAULING, L.; WILSON, E. B. **Introduction to Quantum Mechanics With Applications to Chemistry**. 1. ed. New York: McGraw-Hill, 1935.

PAZINATO, M. S. **Ligações Químicas: Investigação da Construção do Conhecimento no Ensino Médio**. Tese (Doutorado em Educação em Ciências: Química da Vida e Saúde) - Centro de Ciências Naturais e Exatas, Universidade Federal de Santa Maria, 2016.

PENHA, A. F. **Desenvolvimento Conceitual de Licenciandos em Química por Meio da Abordagem Contextual**. 2014. Tese (Doutorado em Ensino, Filosofia e História das Ciências) - Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia / Universidade Estadual de Feira de Santana, 2014.

PORTO, J. A. M.; SILVA, J. L. P. B. O Elétron Rotatório e o Spin do Elétron no Ensino de Química. In: ENCONTRO NACIONAL DE ENSINO DE QUÍMICA, 18., 2016, Florianópolis. **Anais [...] São Paulo: Sociedade Brasileira de Química, 2016. p.1.**

PRODJOSANTOSO, A. K.; A. M.; IRWANTO. The Misconception Diagnosis on Ionic and Covalent Bonds Concepts with Three Tier Diagnostic Test. **International Journal of Instruction**, v. 12, n. 1, p. 1477-1477, 2019.

RABER, D. A. **Aprendizagem Significativa no Ensino de Ciências: Uma Proposta de Unidade de Ensino Potencialmente Significativa sobre Energia e Ligações Químicas.** Dissertação (Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática) - Universidade de Caxias do Sul, 2015.

RAMSAY, W. The Electron as an Element. **Journal of the Chemical Society, Transactions**, v. 93, p. 774-788, 1908.

RIBOLDI, L. PLIEGO, O, ODETTI, H. El Enlace Químico: Una Conceptualización Poco Comprendida. **Enseñanza de las Ciencias**, v. 22, n. 2, p. 195-212, 2004.

ROMPAYOM, P.; TAMBUNCHONG, C.; DECHSRI, P. Using Open-Ended Questions to Diagnose Students' Understanding of Inter - and Intramolecular Forces. **US-China Education Review B**, v. 1, p. 1-22, 2011.

RUSSELL, J. B. **Química Geral, Volume. I.** 1. ed. São Paulo: Pearson, 1994.

SALAH, H. DUMON, A. Conceptual Integration of Covalent Bond Models by Algerian Students. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, p. 675-688, 2014.

SALTZMAN, M. J. J. Thomson and the Modern Revival of Dualism. **Journal of Chemical Education**, v. 50, n. 1, p. 59-61, 1973.

SCALCO, K. C. **Estudo das Representações sobre Ligações Químicas nos Livros Didáticos e suas Contribuições para o Processo de Aprendizagem.** Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Alfnas, 2014.

SCHULTZE, F. NILSSON, P. Coteaching With Senior Students – A Way to Refine Teachers' PCK for Teaching Chemical Bonding in Upper Secondary School. **International Journal of Science Education**, v. 40, p. 688-706, 2018.

SENDUR, G. Are Creative Comparisons Developed by Prospective Chemistry Teachers Evidence of their Conceptual Understanding? The Case of Inter - and Intramolecular Forces. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, p. 689-719, 2014.

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. **Química Inorgânica.** 4. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2008.

SIBANDA, D. HOBDEN, P. Planning a Teaching Sequence for the Teaching of Chemical Bonding. **African Journal of Research in Mathematics, Science and Technology Education**, v. 19, n. 1, p. 23-33, 2015.

SIDGWICK, N. V. **The Electronic Theory of Valency**. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 1929.

SIDGWICK, N. V.; POWELL, H. M. Stereochemical Types and Valency Groups. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 176, p. 153-180, 1940.

SILVA, E. V. **Ligação Metálica e Metais nos Livros de Química Aprovados pelo PNL D 2015**. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática) - Centro de Educação, Universidade Federal de Alagoas, 2017.

SILVA, J. C. O. **Problemas de Aprendizagem sobre Ligações Químicas para Estudantes de Graduação**. Dissertação (Mestrado em Química) - Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2010.

SILVA, R. P. **O Ensino de Ligações Químicas por Meio do Conceito de Energia: Uma Proposta Didática para o Ensino Médio**. Dissertação (Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática) - Universidade Federal de Uberlândia, 2016.

SILVA, S. P.; CAMPOS, A. F. O Ensino de Ligação Química por Meio de Situação-Problema com Estudantes do Ensino Médio. **Experiências em Ensino de Ciências**, v.13, n. 5, p. 32-41, 2018.

SILVEIRA JUNIOR, C. **Ler para Aprender Ligações Químicas em Aulas de Ciências: Investigação, Reflexões e Lições**. Dissertação (Mestrado em Educação) - Faculdade de Educação, Universidade Federal de Minas Gerais, 2012.

SILVEIRA JUNIOR, C. **Mediação Docente da Leitura de Textos Didáticos para o Ensino e Aprendizagem de Ciências nos Últimos Anos do Ensino Fundamental**. Tese (Doutorado em Educação) - Faculdade de Educação, Universidade Federal de Minas Gerais, 2015.

SLATER, J. C. Directed Valence in Poliatomic Molecules. **Physical Review**, v. 37, p. 481-497, 1931.

SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Química Orgânica, Volume I**. 10. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2012.

SOUSA, M. M. **Dialogicidade, Experimentação e Aprendizagem Cooperativa Aplicadas ao Ensino de Ligações Químicas e Interações Intermoleculares**. Dissertação (Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática) - Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará, 2015.

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

TOMA, H. E. Ligação Química: Abordagem Clássica ou Quântica? **Química Nova na Escola**, v. 6, n. 2, p. 8-12, 1997.

TORRES, A. L. **Integrando Música e Química: Uma Proposta Pedagógica Alternativa de Aprendizagem Significativa**. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências da Natureza) - Universidade Federal Fluminense, 2017.

TRINDADE, J. O. **Ensino e Aprendizagem Significativa do Conceito de Ligação Química por meio de Mapas Conceituais**. Dissertação (Mestrado Profissional em Química) - Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, 2011.

TRINDADE, J. O.; HARTWIG, D. H. Uso Combinado de Mapas Conceituais e Estratégias Diversificadas de Ensino: Uma Análise Inicial das Ligações Químicas. **Química Nova na Escola**, v. 34, n. 2, p. 83-91, 2012.

TRUJILLO, C. H. Z. **O Conhecimento Pedagógico Do Conteúdo (PCK) Do Professor De Química E Seu Desenvolvimento A Partir Da Reflexão Sobre Os Modelos De Ligação Química E Sua Modelagem**. Tese (Doutorado em Educação para a Ciência) - Faculdade de Ciências, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, 2017.

TSAPARLIS, G.; PAPPAS, E. T.; BYERS, B. Teaching and Learning Chemical Bonding: Research-Based Evidence for Misconceptions and Conceptual Difficulties Experienced by Students in Upper Secondary Schools and the Effect of an Enriched Text. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 19, p. 1253-1269, 2018.

TURNER, K. L. A Cost-Effective Physical Modeling Exercise To Develop Students' Understanding of Covalent Bonding. **Journal of Chemical Education**, v. 96, n. 6, p. 1073-1080, 2016.

UCE, M. Constructing Models in Teaching of Chemical Bonds: Ionic Bond, Covalent Bond, Double and Triple Bonds, Hydrogen Bond and Molecular Geometry. **Educational Research and Reviews**, v. 10, n. 4, p. 491-500, 2015.

UCE, M.; CEYHAN, I. Misconception in Chemistry Education and Practices to Eliminate Them: Literature Analysis. **Journal of Education and Training Studies**, v. 7, n. 3, p. 202-208, 2019.

ÜNAL, S.; ÇALIK, M.; AYAS, A.; COLL, R. K. A Review of Chemical Bonding Studies: Needs, Aims, Methods of Exploring Students' Conceptions, General Knowledge Claims and Students' Alternative Conceptions. **Research in Science & Technological Education**, v. 24, n. 2, p. 141-172, 2006.

VENKATARAMAN, B. Emphasizing the Significance of Electrostatic Interactions in Chemical Bonding. **Journal of Chemical Education**, v. 94, n. 3, p. 296-303, 2017.

VIGOTSKI, L. S. **A Construção do Pensamento e da Linguagem**. 2. ed. São Paulo: WMF Martins Fontes, 2009.

VOLLHARDT, P.; SCHORE, N. **Química Orgânica: Estrutura e Função**. 6.ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.

VRABEC, M.; PROKSA, M. Identifying Misconceptions Related to Chemical Bonding Concepts in the Slovak School System Using the Bonding Representations Inventory as a Diagnostic Tool. **Journal of Chemical Education**, v. 93, n. 8, p. 1364-1370, 2016.

WANG, C.; BARROW, L. H. Exploring Conceptual Frameworks of Models of Atomic Structures and Periodic Variations, Chemical Bonding, and Molecular Shape and Polarity: A Comparison of Undergraduate General Chemistry Students With High and Low Levels of Content Knowledge. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 14, p. 130-146, 2013.

YAYON, M.; MAMLOK-NAAMAN, R.; FORTUS, D. Characterizing and Representing Student's Conceptual Knowledge of Chemical Bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 13, p. 248-267, 2012.

YIN, R. K. **Pesquisa Qualitativa do Início ao Fim**. 1. ed. Porto Alegre: Penso, 2016.

APÊNDICE A - Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

O **Estudo do Conceito de Ligação Química no Ensino Superior** (doravante referido como **Estudo**) é um projeto de investigação sobre o desenvolvimento do conceito de ligação química no Nível Superior.

O **Estudo** é conduzido por professores e estudantes do Grupo de Pesquisa em Ensino de Ciências e Formação de Professores da UFBA, vinculado ao Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências das UFBA/UEFS.

O/A Sr/a. é convidado/a a participar do **Estudo**, o que envolve:

- 1 - Fornecer respostas a um questionário sobre o conceito de ligação química.
- 2 – Participar de uma entrevista, se necessário, com os pesquisadores do **Estudo** a respeito do conceito de ligação covalente. As entrevistas serão gravadas em áudio e transcritas para obtenção de informações necessárias à pesquisa.

Sua participação é inteiramente voluntária, sem qualquer pagamento ou outra obrigação. O/A Sr/a. poderá deixar de responder a qualquer pergunta do questionário e/ou durante a entrevista, bem como deixar de participar da pesquisa a qualquer momento.

Todas as informações obtidas do/a Sr/a. serão confidenciais, às quais só terão acesso os pesquisadores do **Estudo**. Serão usadas apenas para os fins da pesquisa. A publicação dos resultados da pesquisa poderá conter trechos das suas respostas, porém, mantendo o sigilo a respeito da real identidade dos entrevistados. Quando necessário, serão empregados nomes fictícios e/ou codificados para identificar os entrevistados.

Caso concorde em participar desta pesquisa, por favor, preencha a tabela das informações abaixo e assine este documento.

Este Termo de Consentimento Livre e Esclarecido é assinado em duas vias, uma para o/a Sr/a e outra para o **Estudo**. Caso deseje maiores esclarecimentos, solicitar ao pesquisador.

Declaro que compreendi as informações apresentadas neste documento e dei meu consentimento para participação no **Estudo**.

Nome	
Telefone(s)	
E-mail	

Recife, ___ / ___ / _____.

Assinatura:

Pesquisador	Lucas dos Santos Fernandes
Assinatura	

APÊNDICE B - Roteiro Básico das Entrevistas

Quadro 9 – Roteiro básico das entrevistas e objetivo das perguntas.

Pergunta	Objetivo
Você já lecionou ligação química?	Identificar se o fato de lecionar na educação básica influencia nas respostas
Você estudou ligação química na graduação em quais disciplinas e livros?	Identificar em quais componentes curriculares e por meio de quais materiais didáticos a ligação química foi abordada na formação inicial
Você poderia definir ligação covalente?	Identificar quais características da ligação covalente são citadas voluntariamente
O que significa compartilhamento de elétrons?	Verificar se o estudante sabe explicar o compartilhamento de elétrons na ligação covalente
Qual o papel do spin do elétron na formação da ligação covalente?	Verificar se o estudante sabe explicar o emparelhamento e spins que ocorre na ligação covalente
Como você explica a sobreposição de orbitais na ligação covalente?	Verificar se o estudante sabe explicar a sobreposição de orbitais que ocorre na ligação covalente
Você poderia explicar a formação de uma ligação covalente por meio de alguma teoria quântica?	Verificar se os estudantes sabem explicar a formação da ligação covalente por meio de alguma teoria quântica
O que faz com que dois átomos se liguem covalentemente?	Verificar se os estudantes conhecem os fatores energéticos responsáveis pela formação da ligação covalente
O que determina o comprimento de uma ligação covalente?	Verificar se os estudantes conhecem os fatores que determinam o comprimento de uma ligação covalente
O que determina a direção de uma ligação covalente?	Verificar se os estudantes sabem explicar a direção da ligação covalente

Fonte: Própria.

