



**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE QUÍMICA**

Brenno Peixoto dos Santos

**UM ESTUDO DA LIGAÇÃO METÁLICA NAS
ABORDAGENS CLÁSSICA E QUÂNTICA**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Brasília – DF

2.º/2011



**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE QUÍMICA**

Brenno Peixoto dos Santos

**UM ESTUDO DA LIGAÇÃO METÁLICA NAS
ABORDAGENS CLÁSSICA E QUÂNTICA**

Trabalho de Conclusão de Curso em Ensino de Química apresentada ao Instituto de Química da Universidade de Brasília, como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciada(o) em Química.

**Orientador: Wildson Luiz Pereira dos Santos
Co-Orientador: José Roberto dos Santos Politi**

2.º/2011

DEDICATÓRIA

Dedico essa obra a meus avós paternos Aristeu Peixoto e Sebastiana Rodrigues que sempre me ensinaram que a grande herança que eles me deixariam seriam os estudos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meu Senhor Jesus Cristo por ter além de ter me agraciado com o dom da vida, sempre que precisei de um conforto nos momentos difíceis em seus átrios encontrei um lugar seguro.

Agradeço a minha mãe, Eliete Gomes, por todo carinho e dedicação que sempre recebi dessa grande mãe e serva de Deus e a meu pai, Luzceumar Peixoto. Agradeço a meu segundo pai Mayer Sandro pelo grande carinho e apoio que sempre demonstrou por mim. Agradeço a meu irmão Endriu pelo grande companheiro que ele é. Agradeço a meus amigos Bráulio Rodrigues, Igor Neves e família, Edvan Ribas, Marcus Vinícius, Lorena Andrade, Jhony Marconi e família, Lariça Freitas, André Périclis, Thiago Pimentel e Orlando pelo grande apoio que sempre me deram em meus estudos.

Agradeço aos amigos que fiz durante minha graduação; Pessoas que dividimos tantos momentos felizes de descontração como de dedicação mutua nos estudos e que com certeza levarei essas amizades pelo resto de minha vida: Danilo Umberto, Rafael Moura, Rafael Maia, Jurami Pereira, Guilherme Bandeira, Osvaldo Kojiro, Saulo Jr, Ana Karolina e Sami Izat e, em especial, a uma amiga que se tornou uma grande companheira, Fernanda Marques.

Agradeço aos professores Wildson Luiz e José Politi pelo grande apoio nesse trabalho. Aos professores Rafael Rocha e Heibbe Oliveira por terem me dado as minhas primeiras oportunidade em trabalhar com pesquisa na UnB. Aos professores do ensino de Química da UnB que em suas aulas muito acrescentaram tanto para a minha formação, quanto para a minha paixão pela licenciatura.

Quero dizer a todos vocês que foram citados aqui, essa conquista tem um pedaço de cada um de vocês que me ajudaram em um dado momento, a não carregar sozinho esse fardo. Eu louvo ao Senhor por ter colocado cada um de vocês em um momento específico de minha vida e com certeza quero que saibam que em qualquer momento podem contar comigo. Amo todos vocês.

SUMÁRIO

RESUMO	6
INTRODUÇÃO	7
1. LIGAÇÃO METÁLICA	9
2. MODELAGEM NO ENSINO DE LIGAÇÃO METÁLICA	18
3. ESTUDO SOBRE LIGAÇÃO METÁLICA	30
CONSIDERAÇÕES FINAIS	42
REFERÊNCIAS	44

RESUMO

Um dos temas que tem apresentado ainda uma grande dificuldade em se desenvolver dentro das salas de aula do ensino médio de química é a ligação metálica. Uma das ferramentas que tem sido bastante utilizada na abordagem desse tema é a analogia do “mar de elétrons”. Essa analogia é bastante arriscada de ser utilizada devido a inúmeras confusões que podem ocorrer na compreensão do tema por parte dos estudantes como, por exemplo, os elétrons em uma barra metálica estão “soltos” por toda a barra, o que explicaria a sua condutividade térmica e elétrica, o que não é verdade. A ligação metálica atualmente é melhor explicada pela teoria de bandas que consegue, através de sua abordagem, explicar de forma bastante satisfatória as características observadas nos metais. Com isso, o grande desafio é buscar uma forma de se romper esse comodismo de se explicar a ligação metálica pela analogia do “mar de elétrons” e, ao mesmo tempo, como trabalhar o tema em sala de aula utilizando a teoria de bandas que é uma teoria com bastantes elementos da mecânica quântica e que pode gerar ainda mais dificuldade dentro de sala de aula se a sua abordagem não for feita com bastante precisão. Sendo assim, esse trabalho visa um estudo da ligação metálica através de uma abordagem clássica e uma abordagem quântica visando uma melhor compreensão das ligações metálicas e da teoria de bandas pelos professores de química.

PALAVRAS-CHAVES: mar de elétrons, ligação metálica, teoria de bandas.

INTRODUÇÃO

Uma grande tecnologia que permitiu uma revolução no cotidiano da humanidade foi, sem dúvida, a criação dos transistores. De tamanha a importância, a mesma rendeu aos seus idealizadores, John Bardeen, Walter Houser Brattain e William Bradford Shockley, o prêmio Nobel de Física em 1956. Graças a essa descoberta, pode-se desenvolver uma nova área da ciência: a eletrônica. A partir do processo de instauração da eletrônica, o dia a dia da sociedade foi totalmente transformado, o que permitiu-se a introdução de rádios mais potentes, televisão, computadores, equipamentos eletrônicos em geral. Além disso, a evolução deste sistema continua atrelada a utilização diária com a criação da tecnologia LED (Light Emitting Diode – Diodo Emissor de Luz), por exemplo.

As aplicações dessa tecnologia são viáveis graças a sua alta eficiência e baixo consumo energético. Porém, ao contextualizar seu desenvolvimento tecnológico, antes de tudo foi necessário que os cientistas compreendessem como funciona a transmissão de elétrons entre os átomos dos materiais condutores e desenvolvessem um modelo capaz de descrever satisfatoriamente a ligação química encontrada nesses materiais.

Tenho observado no sistema atual de ensino da Química que um dos conteúdos nos quais menos estão claros os conceitos a eles relacionados, não apenas por base nos livros didáticos de Ensino Médio, mas inclusive na própria formação do docente químico, os conceitos relacionados a ligação metálica. Ao longo da graduação se aprende as ligações covalentes e as teorias de orbitais moleculares, bem como, as ligações iônicas e suas esferas de coordenação e estruturas cristalinas. Essas acabam sendo as mais focadas pelos professores durante a graduação, e com isso as ligações metálicas e a teoria de bandas, praticamente não são abordadas, ou quando o são, é feito em um segundo plano. Dessa forma, essa escassez de foco no ensino sobre ligações metálicas na universidade, reflete não só na formação de gestores do ensino como também no tocante à abordagem nos materiais didáticos. E assim, na maneira como os educadores de Ensino Médio abordam esse assunto na sala de aula.

Atualmente, o modelo de ligação metálica mais comum nos livros didáticos de Química é o modelo “mar de elétrons”. Como tal, descrevem a ligação metálica como os metais em sua forma catiônica e esses cátions encontrando-se em posições ordenadas e submersos em uma espécie de “mar” de elétrons livres. Esses elétrons, de acordo com esta

teoria, estão “livres” entre os íons metálicos, lhes são permitidos um maior fluxo, se comparados aos outros tipos de ligações, covalente e iônica, dando ênfase na condutibilidade térmica e elétrica dos compostos metálicos. Mesmo com esse modelo plausível para explicar algumas das propriedades encontradas nos metais, ao fazer uma análise mais profunda desse modelo apresentado, alguns fenômenos ainda não ficam bem esclarecidos. Por exemplo, depois de se ter aprendido que os elétrons, segundo os postulados de Bohr, estão em uma órbita quantizada de energia, por qual motivo, os elétrons em um condutor podem estar soltos ao redor de um átomo? Uma vez que esses elétrons estão “soltos”, não sofreriam repulsão entre si?

Com o modelo “mar de elétrons” sendo divulgado de uma forma ampla nos livros didáticos atuais, inclusive em livros de Química geral do ensino superior e acabam por forçar o professor a reproduzir esses conceitos à seus alunos, diminuindo assim seus recursos didáticos na tentativa de explicar possíveis questionamentos que podem ser apresentados por eles durante a aula. Sendo assim, questões sobre como ocorrem às ligações entre metais, tendo como base os conhecimentos de física quântica, as ideias de elétrons soltos ficam inconcebíveis de ser explicado em sala de aula, gerando certa insegurança no professor durante a abordagem desse assunto, não o permitindo um maior aprofundamento do mesmo.

Diante da dificuldade do entendimento apropriado da ligação metálica e da dificuldade do ensino desse conteúdo no ensino médio, desenvolvi a presente monografia com o objetivo de apresentar um texto para professores de Química que esclareça as principais ideias em torno dos modelos clássico e quântico sobre ligação metálica. O propósito desse texto é auxiliar os professores na preparação de suas aulas a respeito do assunto. Para isso, além de um estudo teórico sobre as ligações metálicas são apresentados problemas relacionados ao ensino desse conteúdo.

A primeira abordagem será feita em uma perspectiva clássica fundamentando-se na teoria de ligações químicas proposta por Lewis. A segunda abordagem será quântica fundamentada na teoria dos orbitais moleculares (TOM). Assim, através deste trabalho, busca-se apresentar aos profissionais da área de ensino de Química uma forma mais clara e simples as ideias atualmente mais aceitas na descrição da ligação metálica através da teoria de bandas.

No primeiro capítulo é discutido brevemente o histórico sobre as concepções de ligação química até o que diz respeito à ligação metálica e, posteriormente, dentro do mesmo capítulo, uma breve discussão sobre o modelo “mar de elétrons” e uma exposição sobre o histórico e desenvolvimento da teoria de bandas e alguns fundamentos relacionados a ela. No

segundo capítulo, baseado no texto “Modelos e modelagem no Ensino de Química: Um olhar sobre aspectos essenciais pouco discutidos” (JUSTI, 2010) são expostos pontos a respeito da modelagem no ensino de Química, como os tipos de modelagem e os obstáculos que ela pode trazer ao ensino, procurando dar um foco maior na modelagem no ensino de ligações metálicas. No terceiro capítulo é apresentado o estudo de ligações metálicas nas abordagens clássica e quântica.

Através da apresentação deste trabalho, visamos tentar preencher uma certa lacuna que existe no ensino de ligações metálicas. Observamos que o tema é pouco trabalhado no ensino médio e inclusive no ensino superior, com isso o professor de Química fica com pouca bagagem teórica sobre o tema para aborda-lo em sala de aula. Por isso, o principal foco de nosso trabalho é fornecer um material destinado a esses profissionais, abordando o tema ligações metálicas de forma simples e completa para que ao utilizar esse material, o professor possa ter um material de apoio que o auxilie e o fundamente na preparação de suas aulas sobre o tema em questão.

CAPÍTULO 1

LIGAÇÃO METÁLICA

Antes do estudos mais aprofundado sobre as ligações metálicas, no presente capítulo apresenta-se os fundamentos teóricos relacionados a ligação metálica.

Para uma melhor compreensão, é feito um breve histórico sobre o estudo das ligações químicas e sobre a teoria dos metais e ao final é apresentada a teoria de bandas, que se constitui no modelo teórico atual que melhor explica as ligações metálicas.

O histórico sobre as ligações químicas foi extraído do artigo “Ligações químicas: as primeiras teorias” (BEZERRA e SILVA, 2001). O histórico da teoria dos metais foi extraído do artigo “A crônica da Física do Estado Sólido: II. A teoria dos Metais” (BASSALO, 1993). A teoria de bandas foi extraída do artigo “A crônica da Física do Estado Sólido: III. Teoria de Bandas” (BASSALO, 1994).

1.1 Aspectos históricos das ligações químicas

As primeiras discussões sobre como os átomos das substâncias estão ligados foram feitas por Jöhn Jakob Berzelius em 1811. Berzelius descreve que cada átomo consistia em um ou mais pólos elétricos, sendo que essas cargas elétricas se localizavam em partes opostas dos átomos, similar aos pólos de um imã. Assim a atração entre os átomos resultaria na neutralização das cargas elétricas opostas dos átomos. Com o desenvolvimento dos experimentos sobre eletrólise e, a partir dela, o isolamento de alguns metais sólidos e do gás hidrogênio, o cientista, em 1818, desenvolveu a teoria denominada de “Teoria Eletroquímica da Ligação” (ou Teoria Dualística). Segundo esse postulado, os átomos eram positivamente ou negativamente carregados, assim as combinações só eram possíveis entre positivos e negativos. Essa teoria foi inicialmente aceita por físicos e químicos por se ajustar perfeitamente aos compostos da química mineral, mas não permitia conceber a existência de moléculas diatômicas propostas por Avogrado como os gases oxigênio e cloro, por exemplo.

Com o surgimento da Química Orgânica, as teorias que sustentavam a atração elétrica entre os átomos foram diminuindo em popularidade no meio científico. Com os estudos intensificados sobre os compostos de origem animal e vegetal e, por esses compostos serem

formados basicamente por átomos de carbono, hidrogênio e oxigênio, os escritos sobre a natureza da união desses átomos eram preteridos pelos químicos da época, que focaram seus estudos na composição desses compostos. O surgimento das indústrias químicas, especialmente na Alemanha, na metade do século XIX, fez com que a Química Orgânica ganhasse maior destaque e desenvolvimento sem levar em consideração qualquer teoria elétrica de atração entre os átomos. A união entre átomos constituintes desses compostos eram representados apenas com simples traço. Assim sendo, os estudos a respeito desses compostos apontavam o prevalecimento de ligações carbono-carbono e, como todos os átomos de carbono são semelhantes, não haveria a formação de cargas opostas entre eles requeridas para se atraírem e formarem as ligações entre si, revelando a fraqueza da teoria proposta por Berzelius.

Em 1881, o físico alemão Hermann Von Helmholtz convoca a sociedade química da época, uma nova discussão sobre as ideias propostas por Berzelius. No debate, Svante Arrhenius, químico sueco afirma que os experimentos realizados por ele também indicavam a natureza elétrica da ligação entre os átomos. Mesmo com Helmholtz e Arrhenius, apresentando seus argumentos, ainda assim havia certa escassez de evidências conclusivas sobre o papel desempenhado pelas cargas elétricas na união dos átomos. Com a publicação da “Teoria de Coordenação” de Alfred Werner em 1891, era explicado o comportamento e a estrutura de complexos através da introdução dos conceitos de valência primária e secundária, número de coordenação, compostos de adição e compostos de intercalação, algumas novas características observadas em compostos moleculares, como atividade ótica, por exemplo, puderam ser desenvolvidas.

Em 1897, Joseph John Thomson, físico inglês juntamente com sua equipe demonstraram, através de pesquisas, a existência de partículas negativas no átomo – os elétrons – e com isso, Thomson propôs uma teoria que aponta o elétron como responsável pela atração entre os átomos. Ele afirmou que a atração entre os átomos dar-se-ia devido a um dos átomos doar elétrons ao outro átomo e, assim, o átomo que recebeu o primeiro elétron fica negativamente carregado e o que doou o elétron fica positivamente carregado, ocorrendo então, a atração eletrostática entre eles. Em 1903, o físico alemão Johannes Stark sugeriu que a união entre os átomos de uma molécula era resultado do compartilhamento de um elétron entre um par de átomos. Em 1904, o químico alemão Richard Abegg, desenvolveu uma teoria eletrostática semelhante a proposta por Thomson, mas com o diferencial da “Regra do

Octeto” que fornecia uma indicação do número máximo de elétrons envolvidos em uma união atômica.

Alguns cientistas recusavam-se em aceitar a natureza elétrica das ligações químicas como, por exemplo, a teoria proposta pelo cientista irlandês William Thomson, também conhecido como Lord Kelvin. O teórico concordava com a lei proposta pelo físico croata Joseph Boscovitch, na qual os átomos eram na realidade pontos que se comportavam de acordo com a lei oscilatória. Segundo ela, a força entre os átomos varia com a distância, oscilando ora entre atrativa, ora repulsiva. Outros cientistas descrentes com a natureza elétrica das ligações químicas eram os americanos Edgar Fahs Smith e Louís Kahlenberg.

Já no final da primeira década do século XX, um grupo de cientistas do Instituto Tecnológico de Massachussets, nos quais dentre eles Gilbert Newton Lewis, chegaram a seguinte descrição para todos os corpos:

- São formados por átomos que são divisíveis;
- Todos os átomos contém elétrons;
- Todo átomo possui uma espécie de segunda partícula consideravelmente mais pesada que o elétron, responsável pela maior parte da massa do átomo e com carga positiva suficiente para contrabalancear a carga negativa do elétron.
- As forças atrativas entre os átomos são resultado de transferência de elétrons entre eles;

Como os postulados propostos por Niels Bohr sobre o átomo em 1913 levavam em conta todas essas proposições do grupo de cientistas, esses postulados puderam proporcionar uma série de novos debates e questões a serem abordadas como, por exemplo, questões relativas ao espectro atômico e a estabilidade de um átomo dinâmico.

As teorias propostas por J. J. Thomson ainda tinham grande aceitação no meio científico, e conseguiam explicar a grande maioria dos compostos inorgânicos. Com a utilização da eletrólise, os químicos conseguiam demonstrar experimentalmente a existência de átomos carregados positivamente e negativamente. Mas ainda havia grande obstáculo a ser vencido: explicar as ligações químicas em compostos apolares e orgânicos. O cientista americano William Albert Noyes tentou por 20 anos isolar átomos carregados eletricamente nesses compostos. Como não teve êxito em suas pesquisas, Noyes optou por abandoná-la. Harry Fry, na tentativa de explicar esses compostos, propôs um novo tipo de compostos

elétricos, os eletrômeros. Esses, por sua vez, seriam compostos que possuíam a mesma fórmula estrutural, diferindo quanto às cargas elétricas dos átomos constituintes (Figura 1), assim Fry afirmou que conseguiu provar a existência de cargas em compostos orgânicos e apolares. O químico americano Julius Stieglitz, corrobora com a proposição de Fry afirmando que as cargas presentes nos compostos orgânicos eram diferentes daqueles dos inorgânicos e por isso não poderiam ser isolados. Mas, mesmo depois das propostas de Fry e Stieglitz, ainda sim as evidências que contrariavam a teoria positivo-negativa continuavam a crescer quando aplicada a compostos apolares e orgânicos.

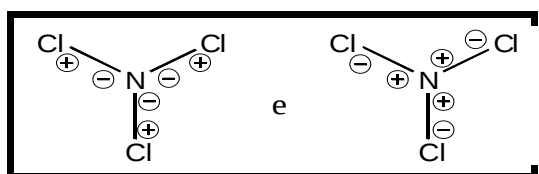


Figura 1: Eletrômero de tricloreto de nitrogênio (NCl_3)

Os cientistas Stuart Bates, Roger Brunel e Gilbert N. Lewis publicaram inúmeras evidências contrárias a teoria positivo-negativa. Sendo assim, em 1916, Lewis propõe a primeira teoria alternativa bem sucedida, descrevendo a função do elétron na formação das ligações apolares. A proposta de Lewis afirmava que ao invés do elétron ser transferido completamente, como descrevia a teoria positivo-negativa, é transferido parcialmente, havendo um compartilhamento de um par de elétrons entre os átomos. Lewis assim conseguiu propor uma teoria mais ampla, uma vez que podia ser aplicada de forma eficiente, os compostos apolares. Lewis ainda afirmava que sua teoria poderia também ser aplicada na explicação sobre a formação de ligações em compostos polares, os quais apresentam uma carga residual. Essa situação é explicada pelo par de elétrons ficar mais próximo do átomo que possui a maior força de atração ficando assim esse átomo aparentemente negativo e o outro positivo. O cientista considerou a necessidade de dois elétrons para se formar uma ligação química. E esses elétrons não se repeliam durante a ligação química devido ao efeito de emparelhamento, conforme o previsto pela Lei de Coulomb. Esse novo modelo proposto permitiu: a resolução de muitos problemas referentes a estrutura das moléculas e uma nova definição de ácidos e bases

A teoria de Lewis começou a circular de forma mais eficaz no meio científico, permitindo sua aplicação em diversos estudos. O químico inglês, Nevil Sidgwick fez uso das

publicações de Lewis de forma bem sucedida em seus estudos sobre os compostos de coordenação. Um cientista que fez ampla divulgação dos estudos de Lewis foi o físico-químico norte-americano Irving Langmuir, um pesquisador da empresa General Eletrics, onde o citou por inúmeras vezes em suas publicações.

Até o ano de 1920, essa teoria qualitativa ainda não era bem fundamentada, mas precisava de um embasamento teórico que lhe permitisse uma melhor sustentação. E essa base começou a ser criada quando o físico austríaco Wolfgang Pauli anunciou o princípio da exclusão, que diz que dois elétrons em um mesmo átomo não podem ter valores idênticos para o quarto número quântico (Número quântico de spin), estando assim de acordo com a proposta de Lewis. O segundo passo que consolidou de vez a teoria de Lewis ocorreu em 1927 com as contribuições à mecânica quântica do físico teórico austríaco Erwin Schrödinger e, com a utilização dessas contribuições, o tratamento teórico efetuado com sucesso para a molécula de hidrogênio pelos físicos Walther Heither e Fritz London.

1.2 Aspectos históricos da teoria dos metais

No ano de 1853, o físico-químico alemão Gustav Heinrich Wiedemann e o químico alemão Johann Carl Rudolph Franz observaram em seus estudos que em um dado intervalo de temperaturas absolutas não muito baixas, a condutividade elétrica dos metais é aproximadamente proporcional a sua condutividade térmica, relação essa que ficou conhecida como a lei de Wiedemann-Franz. Já em 1883, o inventor norte-americano Thomas Alva Edson examinando o enegrecimento da lâmpada incandescente (que inventara em 1879) ao longo de sua utilização descobriu que, para certas voltagens e condições de vácuo, uma corrente elétrica secundária fluía na direção oposta à corrente principal que circulava no filamento, ou seja, migrava do catodo para o anodo. Esse efeito ficou assim conhecido como Efeito Edson que, contudo, não foi explicado por seu descobridor.

Uma das primeiras tentativas de se explicar os metais utilizando-se de uma teoria macroscópica foi efetuada pelo físico alemão Paul Karl Ludwig Drude, em 1900, enquanto estudava as propriedades térmicas e elétricas dos metais. No início, Drude considerou os metais como sendo um gás de íons móveis caracterizados por sua massa, densidade, carga, livres caminhos médios e velocidades médias. Assim, Drude conseguiu calcular a condutividade térmica e elétrica dos metais. Mais tarde, Drude simplificou seu modelo considerando que somente os elétrons eram móveis. Assim, utilizando a velocidade média dos

elétrons fornecidas pela constante de Boltzmann, Drude conseguiu deduzir a fórmula empírica descrita na lei de Wiedemann-Franz. Um pouco antes, porém ainda em 1900, J. J. Thomson tinha proposto a hipótese das cargas vítrea (+) e resinosa (-) e seus diferentes papéis na condução elétrica. De acordo com Thomson a carga resinosa era constituída de raios catódicos (elétrons) e podiam se mover livremente entre os átomos do metal e, por sua vez, a carga vítrea permaneceria fixa nos átomos metálicos.

O físico holandês Hendrix Antoon Lorentz combinou as ideias de Thomson e Drude em uma série de artigos e propôs que os átomos dos metais eram fixos e que os elétrons se deslocavam rapidamente em seus interstícios, desprezando as colisões desses elétrons com os átomos fixos, os quais foram considerados por Hendrix como esferas elásticas e fixas. Anos depois, em suas teses de mestrado e doutorado, Niels Bohr generalizou as propostas de Lorentz considerando que a força entre os elétrons e os átomos como dependendo inversamente de uma enésima potência de suas distâncias relativas.

A hipótese dos elétrons livres, até então vigente, ainda não conseguia explicar alguns outros fenômenos observado nos metais como a diminuição do calor específico do metal com a diminuição da temperatura. Com efeito, em 1907, o físico Albert Einstein demonstrou a dependência em temperatura do calor específico dos metais ao considerar que os átomos funcionariam como osciladores harmônicos cuja a energia era calculada pela teoria elaborada por Max Planck em 1900. Em 1912, o físico-químico holandês Petrus Joseph Wilhelm Debye seguindo o raciocínio de Einstein e considerou o sólido como um contínuo elástico que possui os osciladores harmônicos vibrando em frequências diferentes e Debye demonstrou, assim, a lei de Dulong-Petit na região de altas temperaturas.

O que se observava até o dado momento é que os dois principais modelos propostos para explicar os metais possuíam uma grande incompatibilidade entre eles. O primeiro, ao considerar o metal como gás de elétrons livres e se importando apenas com a movimentação dos elétrons, conseguia ter uma explicação satisfatória tanto para os fenômenos de transporte, representados pela lei de Wiedemann-Franz, como para as propriedades de radiação de calor dos metais. Por sua vez, o modelo de Einstein-Debye-Born-von Kármán, que se baseava no fato dos metais serem constituídos de íons e desconsiderava as excitações térmicas dos elétrons, explicava o calor específico dos metais mas falhava na justificção da razão de serem altos os caminhos médios dos elétrons em termos de suas interações com os íons. Somente a partir da segunda metade da década de 1920 é que se começaram a apresentar algumas soluções para as inconsistências entre a teoria eletrônica e a teoria iônica dos metais.

O primeiro passo foi dado com o aparecimento da estatística quântica de Fermi-Dirac em 1926. Eles, para justificarem um resultado encontrado, tiveram que considerar que o movimento das moléculas de um gás é quantizado. Em 1927, Wolfgang Pauli utilizando-se dessa estatística demonstrou a razão de ser fraco o paramagnetismo em metais considerando um metal como um gás degenerado de elétrons. O argumento adotado por ele foi de que mesmo o campo magnético tentasse alinhar o *spin* de todos os elétrons em sua direção, isso geraria como consequência a possibilidade de mais de um elétron ocupar cada estado de baixa energia, violando o princípio de exclusão anteriormente proposto por ele. Assim, Pauli considerou que somente elétrons de uma fina camada da superfície de Fermi poderiam ser alinhados.

Uma outra contribuição importante para o entendimento dos metais foi apresentada pelo físico alemão Arnold Sommerfeld em 1927/1928. Tendo como ponto de partida as observações de Pauli sobre a degeneração dos elétrons nos metais, Sommerfeld obteve uma série importante de bons resultados como o cálculo do calor específico dos metais, resolvendo assim o dilema da teoria de Drude-Lorentz-Bohr. Ele também solucionou a lei de Wiemann-Franz encontrando um fator matemático mais condizente com as observações experimentais. Um outro trabalho efetuado paralelamente pelo físico alemão Lothar Wolfgang Nordheim onde, nesse trabalho, Nordheim conseguiu demonstrar uma nova expressão para a equação de Dushman-Richardson considerando que alguns elétrons no metal poderia atravessar a barreira de potencial representada pela superfície do metal, mesmo se tivesse energia menor que a altura da barreira. Assim, os trabalhos de Sommerfeld e Nordheim conseguiram explicar o fenômeno observado por Edson descrito anteriormente.

O físico suíço Felix Bloch em 1927 optou por estudar metais do ponto de vista quântico em sua tese de doutorado. Bloch tinha assistido a apresentação de London e Heitler sobre o método usado por eles na construção da função de onda para a molécula de hidrogênio. Assim, Bloch começou a trabalhar na função de onda de um elétron em um potencial unidimensional, assumindo um potencial no qual os elétrons estavam ligados à uma rede com energia muito maior que a energia cinética de seus movimentos de modo que os elétrons estão fortemente ligados aos átomos do retículo cristalino (método “ligações fortes”). Com essa hipótese em mente, Bloch resolveu a equação de Schrödinger por intermédio da análise de Fourier e da teoria de grupo, descobrindo assim um importante teorema que diz que a função de onda do elétron em um alto estado de energia em uma rede periódica perfeita tem a forma de um produto de uma onda plana por uma função periódica. Resumindo, Bloch

conseguiu demonstrar em sua função implicava que o elétron podia mover-se livremente através da rede perfeita. Esse trabalho de Bloch sobre a teoria quântica dos metais permitiu uma série de outros trabalhos sobre a condutância eletrônica dos metais e outras propriedades que acarretaram na Teoria de Bandas que veremos no próximo tópico do capítulo.

1.3 A teoria de Bandas

O primeiro artigo publicado sobre a Teoria de Bandas foi escrito pelo físico suíço Felix Bloch em 1928. Um segundo trabalho importante para o desenvolvimento da Teoria de Bandas foi realizado pelo físico alemão Hans Albrecht Bethe também em 1928. Bethe visou explicar uma discrepância sobre o espalhamento de elétrons em uma rede cristalina observada em 1927 pelos físicos norte-americanos Clinton Davisson e Lester Germer. Ele considerou que os elétrons tem uma energia cinética maior dentro do que fora da rede cristalina, o que ocasiona a diminuição do seu comprimento de onda, explicando assim a discrepância observada. Além disso, Bethe estudou o fenômeno da reflexão seletiva, pela qual os elétrons incidindo em um metal, em certos intervalos de energia, são completamente refletidos e, uma conexão desses intervalos com as bandas proibidas¹ só foi encontrada mais tarde, em 1930, pelo físico norte-americano Philip McCord Morse, conforme veremos um pouco mais adiante.

O físico inglês Rudolf Ernest Peierls também participou do estudo sobre a Teoria de Bandas. Aluno de doutorado de Werner Karl Heisenberg, Peierls foi encarregado por seu orientador a estudar as anomalias observadas no efeito Hall². Para estudar essas anomalias, Peierls considerou que a taxa temporal dos componentes do pacote de ondas de um elétron em campos elétricos e magnéticos é dado pela força de Lorentz³, generalizando assim o trabalho de Bloch. Peierls conseguiu obter a constante de Hall no limite em que as bandas são ligeiramente preenchidas. Com isso, Peierls demonstrou a existência de descontinuidades no espectro de energia dos elétrons livres em um retículo cristalino sujeito a um potencial periódico fraco.

Essas descontinuidades também foram observadas por Morse enquanto ele trabalhava nos laboratórios da Bell Telephone ao analisar alguns resultados experimentais obtidos por

1 Corresponde a diferença de energia entre a banda de valência e a banda de condução.

2 Efeito Hall: Quando um fio condutor, percorrido por uma corrente elétrica, é colocado na presença de um campo magnético, provoca o surgimento de uma corrente perpendicular a direção de propagação da corrente inicial.

3 Forças de Lorentz: Força eletromagnética que atua em uma carga Q quando se move com a velocidade V em uma região do espaço sobre influência simultânea de um campo magnético e elétrico.

alguns cientistas sobre a difração de elétrons em superfícies metálicas. Utilizando equações análogas as utilizadas por Bethe, Morse demonstrou que a variação periódica (iguais intervalos de tempo) do potencial dentro de um cristal cria bandas proibidas de energia mesmo para elétrons com energia maior que a máxima energia potencial, fazendo assim a primeira conexão explícita entre a estrutura de bandas dos sólidos e a difração de elétrons incidindo nos mesmos.

Em 1931, novas contribuições para o desenvolvimento da Teoria de Bandas foi dada pelo físico Alan Harris Wilson. Estudando os trabalhos de Bloch e Peierls, Wilson percebeu que a teoria de Bloch (segundo a qual os elétrons ligados fortemente poderiam mover-se através do metal) sugeria que qualquer sólido poderia ser um metal. Por outro lado, os trabalhos de Peierls indicavam que uma banda cheia não conduzia corrente. Sendo assim, Wilson apresentou a ideia de que os elétrons quase livres (similares aos da banda de valência) poderiam formar camadas abertas e fechadas, chegando assim ao resultado de como se é possível obter a condução tanto com elétrons ligados como com elétrons livre. Esses resultados permitiram Wilson fazer a clara distinção entre condutores e isolantes. Assim ficam definidos como sólidos condutores aqueles que apresentam a banda de energia parcialmente cheia e sólidos isolantes como aqueles que apresentam a banda de energia completamente cheia de elétrons. Dessa forma, essa teoria ficou conhecida como “Teoria de Bandas”.

Atkins e Jones (2006) explicam a “Teoria de Bandas” dos sólidos a partir da teoria dos orbitais moleculares. Nos retículos cristalinos formados nos metais e em materiais semicondutores, a proximidades entre os átomos desses materiais permitem a formação de N orbitais atômicos (em metais, esse N é um número enorme. Só se tomando como exemplo, em 10 g de cobre metálico, esse número N pode chegar a 10^{23}) que se fundem para formar uma banda com N orbitais moleculares sendo que, a metade tem característica líquida ligante e a outra metade tem característica líquida antiligante. Como cada um dos átomos fornece um número de elétrons de valência (número esse que varia de acordo com cada metal), esses elétrons irão ocupar os orbitais ligantes de mais baixa energia, permitindo assim a formação de regiões de orbitais moleculares vazios ou incompletos que são denominadas como Bandas de Condutividade. Como a energia dos orbitais vizinhos é praticamente a mesma, gasta-se uma mínima quantidade de energia adicional para a excitação de um elétron do HOMO para o LUMO. Esses elétrons que estão na banda de condução podem mover-se livremente pelo sólido e assim podem carregar uma corrente elétrica.

CAPÍTULO 2

MODELAGEM NO ENSINO DE LIGAÇÕES METÁLICAS

Para a compreensão de como os átomos estão unidos uns aos outros através de ligações químicas, se faz necessário que os alunos partam de uma compreensão macroscópica para um entendimento a nível microscópico. Um dos recursos que os educadores em Química comumente utilizam nesse tipo de abordagem é uma representação a partir de um modelo. Pode-se afirmar que modelo em ciência “é uma representação parcial de uma entidade, elaborado com um, ou mais objetivo(s) específico(s) e que pode ser modificado” (GILBERT, BOULTER e ELMER⁴, apud JUSTI, 2010. p.211). Especificamente em Química, trabalhar com modelos é uma parte intrínseca da nossa área de conhecimento porque, sem a utilização da modelagem, a Química ficaria reduzida a uma mera descrição de propriedades macroscópicas e suas mudanças (FERNANDEZ e MARCONDES, 2006).

Os modelos são elaborados no sentido de simplificar entidades mais complexas, favorecer a comunicação de ideias, facilitar a visualização de entidades abstratas, fundamentar a proposição e a interpretação de experimentos sobre a realidade e ser um mediador entre a realidade modelada e a teoria sobre ela. Os autores Boulter e Buckley qualificam os modelos em: modelo mental (representação privada e pessoal criada por um indivíduo), modelo expresso (uma versão de um modelo mental disponibilizada ao domínio público), modelo consensual (modelo concordado por um grupo social), modelo científico (modelo concordado pela comunidade científica) e modelo histórico (modelo científico que foi aceito em um contexto que não o atual) segundo Justi (2010)⁵. E esses modelos podem ser representados de cinco modos: O modo concreto é aquele caracterizado pela utilização de materiais resistentes para a produção de uma representação tridimensional, como, por exemplo, a utilização de balões de ar para mostrar a geometria de moléculas; segundo modo de representação utilizado é o modo verbal. Nesse modo as entidades são descritas e relacionadas entre elas, podendo ser utilizadas metáforas e analogias em sua descrição; O modo matemático é aquele

4 GILBERT J. K.; BOULTER, C.J.; ELMER, R. Positioning Models in Science Education and in Design and Technology Education. In: GILBERT, J.K.; BOULTER, C. J. (Eds). *Developing Models in Science Education*. Dordrecht: Kluwer, 2000. p.3-17

5 BOULTER, C.J.; BUCKLEY, B.C. Construting a Typology of Models for Science Education. In: GILBERT, J.K.; BOULTER, C.J. (Eds.) *Developing Models in Science Education*. Dordrecht: Kluwer, 2000. p.41-57

compreendido pelas equações como, por exemplo, a equação dos gases ideais. O modo visual implica em uma representação bidimensional como gráficos, diagramas e animações. O último modo é o gestual, que se é feito o uso do corpo humano ou de algumas de suas partes (JUSTI, 2010).

Como esse modelos tem como objetivo simplificar, ou seja, tentar aproximar de uma forma mais simples os alunos aos conceitos científicos à eles ensinados, eles tem sido largamente utilizados no ensino. Como a Química em si é uma ciência que se exige um alto grau de abstração, esses modelos acabam por se fazer altamente necessários no processo de aprendizagem desses alunos. Então, cabe ao professor e/ou os livros didáticos o papel de simplificador dos modelos científicos e, essas simplificações são denominadas *modelos curriculares* (GILBERT⁶, apud JUSTI, 2010. p.216). Assim, espera-se dos educadores, a capacidade de trazer ao nível cognitivo dos alunos, os temas, questões e representações que os modelos científicos possuem.

Quando se tem por objetivo específico ajudar a compreensão dos alunos a um aspecto específico do modelo curricular, esse modelo adotado é denominado de *modelo de ensino*. Os modelos de ensino são indicados quando o modelo curricular ainda é de difícil compreensão por parte dos alunos. Suas formas mais comum são modelos concretos, desenhos, gráficos e simulações. Por possuírem um grande potencial no auxílio ao ensino, eles são frequentemente adotados por professores e materiais didáticos (CARVALHO e JUSTI⁷, apud JUSTI, 2010. p.217).

Dentro do modelo de ensino, o educador em Química deve se atentar que esse modelo funciona apenas como uma ponte para o entendimento do modelo curricular. Justi(2010) em suas pesquisas sobre a extensão em que a introdução de modelos de ensino pode contribuir para que os estudantes compreendam alguns conceitos químicos, em especial, átomos, ligações químicas e equilíbrio químico, mostra que os modelos têm sido falhos tanto em relação a seus objetivos declarados quanto em contribuir para que os estudantes entendam o significado de “modelo”. As razões observadas por Justi (2010) foram as seguintes:

- Os modelos de ensino têm sido usados de modo para fazer com que pareçam “fatos” para muitos estudantes e professores. Os estudantes

6 GILBERT, J.K.; Visualization: An emergent field of practice and enquiry in science education. In: GILBERT, J.K.; REINER, M.; NAKHLEH, M. (Eds.) Visualization: Theory and Practice in Science Education. Dordrecht: Springer, 2008. p.3-24

7 CARVALHO, N.B.; JUSTI R. Papel da Analogia do “mar de elétrons” na compreensão do modelo de ligação metálica. Enseñanza de la Ciencias, Barcelona, 23, extra, 2005.

frequentemente não tem conseguido diferenciar os modelos da realidade e não consideram que os modelos sejam diferentes das características observáveis que eles estão querendo explicar. De fato, o que se observou, foi que professores e livros didáticos representam átomos e moléculas frequentemente como reais e factuais, deixando de lado as origens de sua evolução a partir dos modelos teóricos da matéria e não dando a correta atenção a natureza das representações que são apresentadas;

- Dão suporte ao estabelecimento de modelos híbridos, isto é, aqueles constituídos por elementos históricos diferentes, como se eles formassem um todo coerente. O principal exemplo disso é que o modelo atômico de Rutherford é representado, em muitos livros, por um desenho que se assemelha ao sistema solar. Assim, ao se apresentar esse modelo, os autores ignoram que quem propôs os elétrons em órbitas circulares ao redor do núcleo foi Bohr, gerando assim como consequência a não diferenciação por parte dos alunos dos dois modelos, ficando como compreendido a existência de apenas um modelo.

- A introdução de aspectos incorretos em determinados modelos mediante o uso inadequado de cores e outros elementos gráficos. Um clássico exemplo é a comum representação em livros de Química de líquidos com a cor azul. Isso inviabiliza a distinção entre sistemas líquidos diferentes, assim como o entendimento de que os líquidos são constituídos de partículas.

- O não acompanhamento de discussões de suas limitações. Frequentemente, autores de livros e professores apresentam modelos de ensino como se eles fossem perfeitos, como se eles representassem todos os aspectos da entidade modelada, como se fossem capazes de explicar todos os aspectos envolvidos no sistema. Por exemplo, os alunos tendem a não entender que a velocidade de uma reação química pode ser representada por meio de um gráfico ou de uma equação matemática. (p.219)

Outro modelo de ensino que merece um destaque é a analogia. Ela é de grande importância devido ao raciocínio analógico nos processos cognitivos. Como os conceitos em Química são de natureza abstrata, eles não são de fácil compreensão e visualização por parte dos estudantes, o que justifica a adoção de analogias por parte dos professores na tentativa de trazer algo mais próximo da realidade desses estudantes. Sendo assim, o raciocínio analógico favorece a atribuição de significados aos fenômenos científicos por estabelecer relações com os conhecimentos prévios dos alunos. Mas mesmo assim, as analogias devem ser utilizadas de forma correta e apenas quando necessária, porque elas podem induzir a erros conceituais e/ou reforçar concepções alternativas que os estudantes possuem em relação a vários outros conceitos químicos. Um grande exemplo dessas analogias incorretas é a utilização de antropomorfismos, ou seja, dar características humanas a entidades submicroscópicas. Por isso, é de grande importância que os professores compreendam com mais detalhes os processos envolvidos no raciocínio analógico a fim de que se possa utilizar os recursos analógicos de forma mais clara e objetiva, favorecendo assim o processo de aprendizagem dos estudantes.

2.1 Concepção de alunos sobre as ligações metálicas

Em um estudo publicado em 2002, Keith S. Tarber, dentre outras discussões dentro do mesmo tema (ligações metálicas), apresentou um série de entrevistas com alunos de diferentes séries do ensino médio sobre como, na concepção deles, os átomos dos metais estariam unidos. Nesse estudo observou-se que, de um modo geral, a medida em que os alunos estavam mais avançados em seus estudos, as concepções sobre a ligação metálica ia aumentando em complexidade e, através de ilustrações feitas pelos próprios alunos, eles transformavam os modelos mentais idealizados por eles em modelos expressos. Os diferentes modelos apresentados nesse artigo foram os seguintes (TARBER, 2002):

a) Não existe ligações nos metais

Quando um grupo de alunos foi apresentado a uma figura representando um arranjo estrutural da substância ferro (figura 2), conforme é comumente representado em livros didáticos, um grupo de alunos percebeu que não haveria necessidade de haverem ligações entre os átomos devido a todos esses átomos serem iguais.

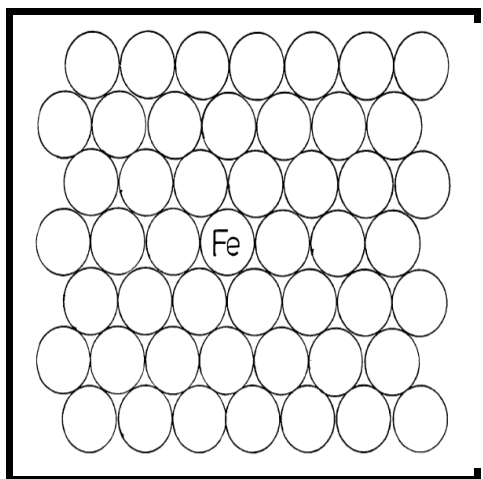


Figura 2: Ilustração do ferro metálico

b) Existem várias formas de interações nos metais, mas não necessariamente ligações

Observando a mesma figura (figura 2), um outro grupo de alunos concordou que devia haver algo que mantivesse os átomos de ferro unidos, mas não seria necessariamente uma ligação química. Esse grupo de alunos, devido a sua escolaridade, estava mais familiarizado com as ligações covalentes e iônicas e, por isso, achavam que outra forma de ligação entre os

átomos não seriam possíveis. Uma estudante desse grupo sugeriu que as ligações que ocorreriam nessa estrutura seriam similares as ligações iônicas onde os átomos doariam e receberiam elétrons entre si, mais de um jeito diferente por envolver orbitais “d”.

c) Metais fazem ligações covalentes

Um outro grupo reconheceu a necessidade de os átomos de ferro estarem unidos através de ligações químicas devido a figura 2 simbolizar o ferro no estado sólido e, caso não houvesse essas ligações unindo esses átomos, o ferro estaria no estado líquido ou gasoso. Esse grupo, também mais familiarizado com as ligações iônicas e covalentes, sugeriu que as interações que mantinham esses átomos unidos eram de caráter covalente. Dentre esse grupo, um aluno em especial chamado Mike disse que:

Se um átomo tem, digamos, seis elétrons na sua camada de valência, seria necessário mais dois elétrons de uma outra substância para equilibrar, completando o octeto. Então, outro átomo tem que compartilhar dois elétrons para construir a camada de valência. (TARBER, 2002, p.741. Tradução nossa)

e, a partir da análise da Figura 2, Mike deduziu que o ferro necessitaria de 6 elétrons para preencher a sua camada de valência, parecendo assim que Mike estava interpretando a geometria apresentada na figura.

d) Metais fazem ligações similares às ligações covalentes

Um aluno chamado Kabul sugeriu que existiria uma ligação, diferente da iônica e da covalente, nos metais. O aluno chamou este tipo de interações de “ligação metálica” sendo, segundo ele, o tipo de interações que ocorrem entre átomos metálicos. Depois, Kabul desenhou uma representação de como seria a ligação metálica segundo a sua perspectiva (Figura 3).

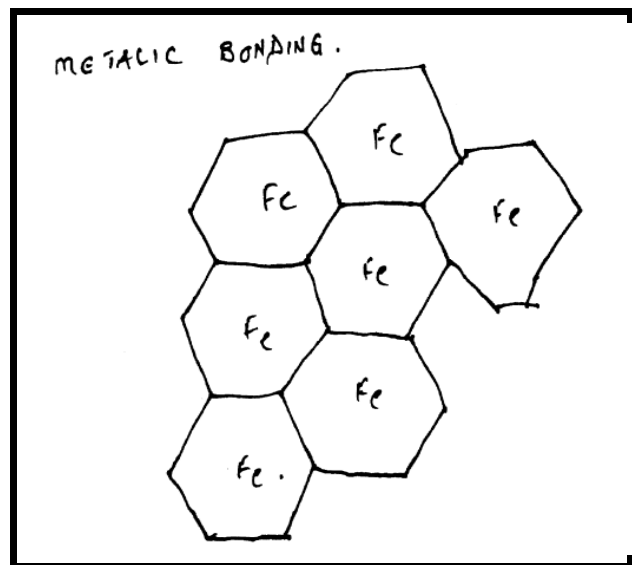


Figura 3: Representação de Kabul sobre a ligação metálica

A ideia de Kabul em desenhar o ferro como hexágonos partiu do princípio de que, segundo ele, o ferro teria dois elétrons no orbital s e quatro elétrons no orbital d , totalizando seis elétrons na camada de valência disponíveis para as ligações e assim, a representação na forma de hexágono simbolizaria esses seis elétrons disponíveis para as interações e, seguindo esse raciocínio, de acordo com o número de elétrons disponíveis para essas interações, o número de lados da figura geométrica representacional também iria variar mas, para os elementos do bloco s e p , ele não saberia como representar. Assim, Kabul definiu a ligação metálica como uma ligação similar a ligação covalente.

e) Metais fazem ligações iônicas

Um aluno sugeriu que o metal sódio realizaria um conjunto de ligações iônicas dentro da rede formada pelos átomos. Um outro aluno observando a Figura 2 disse que os átomos de ferro, por serem átomos metálicos, não estariam unidos por ligações covalentes e sim iônicas já que, segundo esse aluno, os átomos de ferro perderiam elétrons, transformando-se em cátions e esses elétrons seriam transferidos à átomos de ametais que não foram representados na figura. Essa transferência de elétrons, na ótica do aluno, só ocorreria com a presença de calor ou outra fonte de energia para permitir essa reação.

f) Metais possuem ligações iônicas e covalentes

Um aluno entrevistado disse que a ligação de um metal deve envolver compartilhamento de elétrons e ainda devem existir dentro dos metais elétrons livres para se moverem. O componente “elétrons compartilhados” é covalente e os elétrons livres para se moverem são atraídos para o positivo, formando assim a ligação iônica. Ainda dentro desse raciocínio, esse aluno disse:

Metais são bons condutores por possuírem poucas ligações covalentes e por serem constituídos principalmente de ligações iônicas e Van der Waals. (TARBER, 2002, p.743. Tradução nossa)

g) Ligações metálicas ocorrem apenas em ligas metálicas

Nesse tópico ocorreu a primeira citação por parte dos alunos a respeito da relação ligação metálica – mar de elétrons. O aluno chamado Umar, na primeira vez em que ele foi entrevistado, ao observar a Figura 2 disse que os átomos de ferro estão ligados por ligações metálicas, ligações essas que envolvem um “mar de elétrons” que, segundo suas palavras:

Em metais, você tem a formação de íons positivos e negativos que se atraem. Os metais são bons condutores de eletricidade e, quando aquecidos no vácuo, emitem elétrons. Isso pode ser explicado pelo fato de nos metais existirem elétrons deslocados, elétrons esses que agem como um mar de elétrons e íons metálicos positivos que se atraem e formam uma rede. Os íons positivos formados não se repelem devido a blindagem formada pelo mar de elétrons. (TARBER, 2002, p.744. Tradução nossa)

A concepção de Umar sobre moléculas metálicas parecia estar relacionada com a covalência dos átomos, ou seja, segundo ele, o número de átomos em uma molécula metálica (TARBER, 2002) penderia de quantos elétrons na camada mais externa e quantas ligações entre eles poderiam ser feitas. Umar acreditava que a ligação metálica existia entre dois metais. Um exemplo citado por ele foi uma liga de cromo e ferro onde nessa liga as ligações acontecem devido a presença de íons sendo que, o cromo poderia ser o íon negativo e o ferro o íon positivo, assim finaliza ele que as ligações metálicas são ligações parecidas com as iônicas, mas ocorrem apenas entre metais.

h) Metais literalmente possuem o mar de elétrons

A metáfora “mar de elétrons” no ensino de ciência é muito comum. O exemplo de Umar citado no item anterior nos mostra o desenvolvimento de um início de rota de definição das ligações metálicas, tornando-se uma parte importante na construção de um modelo mental coerente. Umar não foi o único aluno a aprender a metáfora “mar de elétrons” como expressão isolada sem contemplar o modelo de uma forma completa. Por exemplo, as figuras abaixo representam os diagramas propostos por estudantes, com suas próprias palavras, em exames realizados para alunos de final de curso.

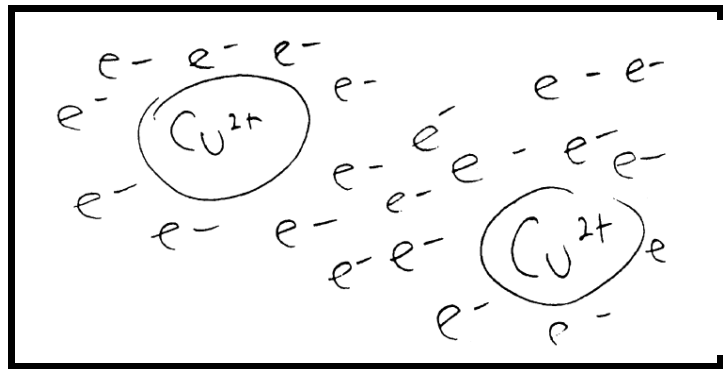


Figura 4: "O cobre é unido por ligações metálicas, onde o cátion central é rodeado por um mar de elétrons. (Traduzido)"

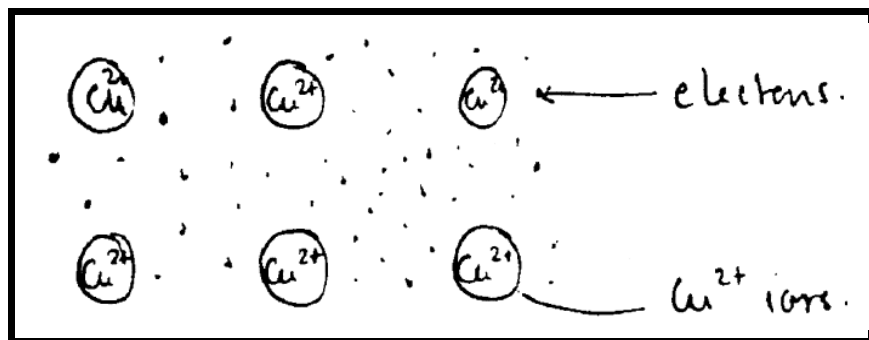


Figura 5: "O cobre forma ligações metálicas, ou seja, seus íons são rodeados por um mar de elétrons. (Traduzido)"

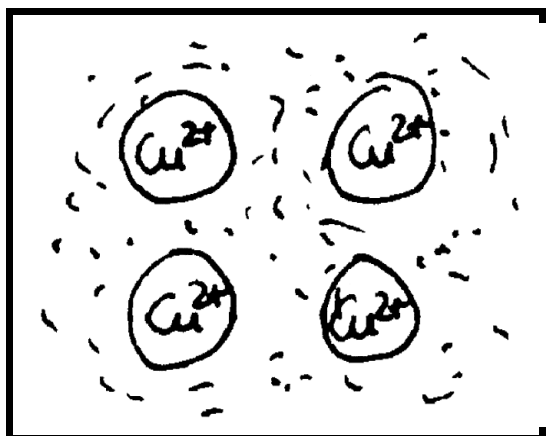


Figura 6: "O cobre é um metal. Tem uma estrutura metálica composta por ligação metálicas, ou seja, íons carregados positivamente em um mar de elétrons. (Traduzido)"

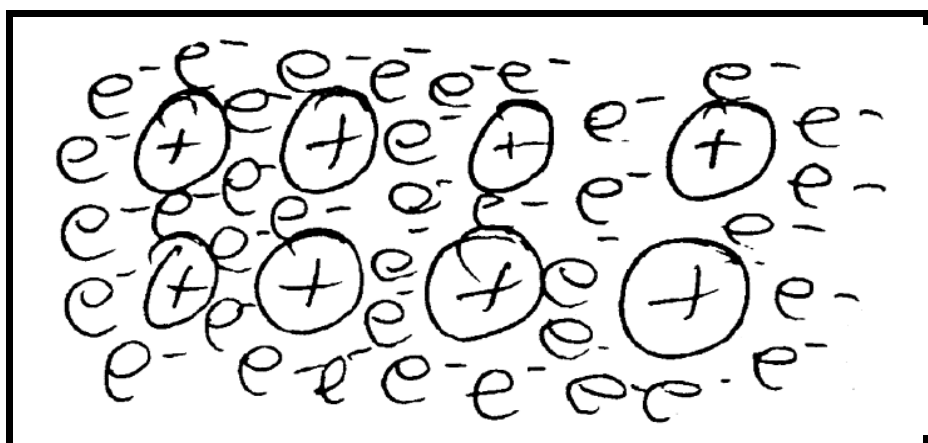


Figura 7: "Cobre. Que tem ligações metálicas. Em ligações metálicas os átomos são mantidos juntos em um mar de elétrons que age como uma cola. (Traduzido)"

A metáfora “mar de elétrons” ainda é descrita por alguns alunos como:

Noor: A ligação metálica é um tipo especial de ligação eletrostática em que os elétrons de valência em um átomo fluem livre na estrutura metálica. Os átomos positivos e os negativos elétrons deslocalizados que fluem na estrutura atraem-se entre si. (TARBER, 2002, p.746. Tradução nossa)

Tadjiiner: Os elétrons estão como que flutuando... flutuando sobre um mar de elétrons... Eles estão flutuando sobre os elétrons mais externos... é como se os elétrons flutuassem sobre... . (TARBER, 2002, p.746. Tradução nossa)

Outros estudantes citaram:

- Ilhas de íons de Cu^{2+} ;
- Uma carga positiva como uma ilha rodeada por elétrons ;
- O “mar de elétrons” fluem nas ligações metálicas ;
- Íons metálicos estão suspensos em um “mar” de elétrons livres dissociados ;
- Os íons estão flutuando em um mar de elétrons deslocalizados ;

i) Metais tem elétrons deslocalizados para preencherem camadas externas

Em uma nova entrevista já realizada no final do curso, Umar já conseguiu explicar que os átomos buscam completar a sua camada de valência. Ele disse que os átomos metálicos presentes perdem seus elétrons mais externos, tornando-se assim íons positivos e com uma configuração eletrônica semelhante a gases nobres. Essas explicações por parte de Umar ocorreram após já lhe ter sido ensinado que as ligações metálicas envolvem forças eletrostáticas e sobreposições de orbitais que originam uma grande rede de orbitais moleculares. Outros alunos entrevistados dentro da mesma condição de Umar também concordam que os metais tendem a perder seus elétrons mais externos (elétrons deslocalizados) para adquirirem a configuração eletrônica semelhante aos gases nobres.

j) Metais tem um “mar de elétrons” metafórico

Um aluno considerou as atrações eletrostáticas entre cátions e ânions e, segundo ele, o “mar de elétrons” seria um recurso a parte. Em suas palavras:

A ligação metálica ocorre apenas entre metais e é resultado de atração entre cargas positivas do metal e as cargas negativas dos elétrons. Ele também possui um mar de elétrons que flui entre eles. (TARBER, 2002, p.747. Tradução nossa)

Um outro aluno também se utilizou da metáfora “mar de elétrons” para descrever a ligação metálica no lítio como “um monte de núcleos de lítio rodeados por um mar de elétrons que são livres para se moverem nas camadas mais externas de cada um dos átomos de lítio”.

2.2 Discussão dos resultados observados

Uma vez que os dados obtidos por Tarber (TARBER, 2002) foram coletados em um contexto um pouco limitado (dados obtidos em escolas britânicas) seria inapropriado se discuti-los e generalizá-los mas, com a escassez de discussões sobre esse tema na literatura pode-se, a partir desse estudo, fazer alguns apontamentos que, ao meu ver, são pertinentes a discussão proposta nesse trabalho. A partir desse estudo podemos ter uma breve noção de como os alunos estão construindo modelos mentais de ligação metálica. De uma forma geral e panorâmica, pode-se observar que esses estudantes buscam sempre relacionar de alguma forma os conceitos antes aprendidos por eles sobre ligações químicas (ligações iônicas e ligações covalentes) a essa nova categoria de ligações: as ligações metálicas.

Os alunos que estão no início de seus estudos em Química tenderam a conceituar ligação metálica de poucas formas como: Não há propriamente uma ligação química entre os metais; as ligações são de caráter iônica e/ou covalente e existe um mar de elétrons. É bastante claro e aceitável que alunos iniciantes não observassem que existissem ligações entre os metais, isso pode ser explicado pelo fato de eles ainda não terem claro os modelos moleculares como nós assim os possuímos.

A medida em que os alunos iam avançando em seus estudos, novos modelos eram apresentados até que alguns alunos já se aproximavam dos conceitos da teoria de bandas mas, ainda sim, o que se observou como grande tendência desses estudantes foi que o termo “mar de elétrons” continuava sendo o grande recurso na construção desses modelos porque com os elétrons “soltos” em torno dos cátions metálicos, eles explicavam a condutividade elétrica desses materiais e conseguiam aliar os conceitos de ligações iônicas e covalentes em seus modelos. Para esses alunos, o fato de os metais adquirirem uma conformação onde tivessem orbitais totalmente preenchidos era de maior importância que a busca pela própria manutenção da estrutura.

Outro ponto a se observar é que os alunos entenderam que seria necessário que “algo” mantivesse os átomos metálicos unidos na manutenção da estrutura sólida mas ainda se mantinham relutantes em considerar que esse “algo” seria uma ligação química. Como até então os conceitos de ligações químicas compreendidos pelos alunos envolviam fluxo de elétrons (compartilhamento e doação) ficou um pouco complicado de se aplicar esses termos em uma estrutura metálica. Um grupo de alunos tendeu a relacionar ligações covalentes e outro grupo a relacionar ligações iônicas aos materiais metálicos, chegando até a indicar o

número de ligações que cada átomo de metal poderia fazer. A aplicação do modelo iônico as ligações metálicas foi a que se apresentou mais problemática devido a tendência dos alunos em relacionar a ligação iônica com transferência de elétrons, chegando a citar que os metais doariam os seus elétrons aos não-metais, o que se mostra inconsistente em se tratando de um material estritamente metálico.

A regra do octeto também fez parte da construção dos modelos mentais apresentado. Alguns alunos compreenderam que a doação de elétrons de camadas mais externas para a rede para assim os metais adquirirem estrutura eletrônica semelhante aos gases nobres era uma forma bastante plausível de se compreender a ligação metálica.

Aos alunos que estavam cientes de que as ligações metálicas apresentavam características diferentes das ligações iônicas e covalentes buscaram defini-las em termos da presença do “mar de elétrons”. Esses alunos pensaram nas explicações dos fenômenos observados em estruturas metálicas e em cátions submersos em um “mar” de elétrons mas não pensaram na possível consequência desse modelo como o próprio “mar de elétrons” comprometeria a estrutura sólida do metal.

De uma forma geral, o que se pode observar é a quantidade de obstáculos que um professor de Química deve prever durante o processo de construção de modelos mentais por parte dos alunos. A perspectiva construtivista no ensino de Química revela a importância da aprendizagem prévia na construção de novos conceitos, o que foi bastante observado no estudo de Keith S. Tarber (2002) referente a forma como os modelos mentais de ligações metálicas foram ganhando complexidade a medida que o grau de escolaridade dos alunos entrevistados avançava e, dentro dessa perspectiva e da atuação do educador como mediador desse processo, deve se ter uma grande sensibilidade e paciência durante esse processo. Por ser muito comodo para o educador explicar ligações metálicas utilizado a analogia “mar de elétrons” devido a mesma, aparentemente, explicar as propriedades observadas em materiais metálicos e ser, de uma certa forma, de fácil compreensão por parte dos alunos, ainda sim penso que o professor de Química deve apresentar sim essa analogia mas como uma forma de degrau para se alcançar a correta compreensão das ligações metálicas, ou seja, em cima dessa analogia, apresentar a suas falhas e dentre os questionamentos que surgirão por parte dos alunos, conduzir o processo de aprendizagem na direção correta do modelos de bandas metálicas.

CAPÍTULO 3

ESTUDO SOBRE LIGAÇÃO METÁLICA

Talvez o grande desafio em se explicar como ocorrem as ligações em substâncias metálicas é a correta compreensão do porque desses materiais conduzirem corrente elétrica em seu estado sólido enquanto substâncias iônicas e covalentes não o fazem. Dentro dessa proposta, buscamos neste capítulo apresentar um texto destinado aos professores de Química que traz a abordagem clássica e a quântica de como se dá as ligações em substâncias condutoras de corrente elétrica. A abordagem clássica tem como foco trabalhar o tema ligações metálicas baseando-se na teoria de Lewis de ligações químicas enquanto na abordagem quântica baseia-se na teoria do orbital molecular (TOM).

Esperamos com o presente texto tornar mais fácil a compreensão da ligação metálica pelo professor de forma que ele possa possuir mais recursos na preparação de suas aulas sobre o assunto.

3.1 Estudo das ligações químicas em uma abordagem clássica

3.1.1 Ligação iônica

As ligações químicas ocorrem entre átomos devido a tendência em que as substâncias possuem em buscar uma conformação onde um estado menos energético seja alcançado, aumentando assim a estabilidade da mesma.

Um desses estados menos energéticos observado ocorre quando há ligação iônica. Tomemos como exemplo o sal cloreto de sódio (NaCl). O cloro nesse composto se liga ao sódio e vice-versa devido ao sistema ficar em um menor estado energético se comparado aos dois átomos em seus estados fundamentais. Esse estado menos energético é alcançado devido ao átomo de cloro, com seu alto valor de eletronegatividade⁸, atrair para a sua eletrosfera o elétron mais externo do átomo de sódio, que possuem um baixo valor de eletronegatividade. Como o cloro passa a possuir em sua eletrosfera um elétron a mais se comparado ao seu

8 Eletronegatividade: Propriedade periódica que mede a tendência que os átomos possuem em atrair para a suas eletrosferas elétrons. Escala inicialmente proposta por Linus Pauling devido a resultados observados em seus estudos sobre energias de ligação. Posteriormente, Robert Mulliken definiu numericamente esses valores.

estado fundamental, faz com que o ânion cloro (Cl^-) esteja em um estado energético maior que se comparado ao seu estado fundamental, o mesmo acontecendo com o átomo de sódio que teve o seu elétron arrancado, ficando assim as duas espécies Na^+ e Cl^- em um estado energético $145 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ maior que as suas espécies no estado fundamental (ATKINS, 2006). O grande ganho energético é observado quando as duas espécies se aproximam por eletrostática, graças a formação de duas espécies com cargas formais, e formam a ligação entre elas. Assim as novas espécies ligadas atingem um estado energético $642 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ menor se comparado as mesmas em seu estado fundamental, gerando assim um estado mais estável para as espécies se organizarem. Resumindo, as ligações iônicas ocorrem quando possuímos duas espécies com uma diferença considerável de eletronegatividade, eletronegatividade essa suficiente para que uma das espécies consiga atrair para a sua eletrosfera os elétrons mais externos da espécie com menor eletronegatividade e essa atração gere duas espécies com cargas formais positivas e negativas que sofreram atração eletrostática que no processo completo, gera um estado energético menor que o das espécies em seu estado fundamental. E essas ligações geram como consequência não compostos moleculares como veremos a seguir, mas sim retículos cristalinos.

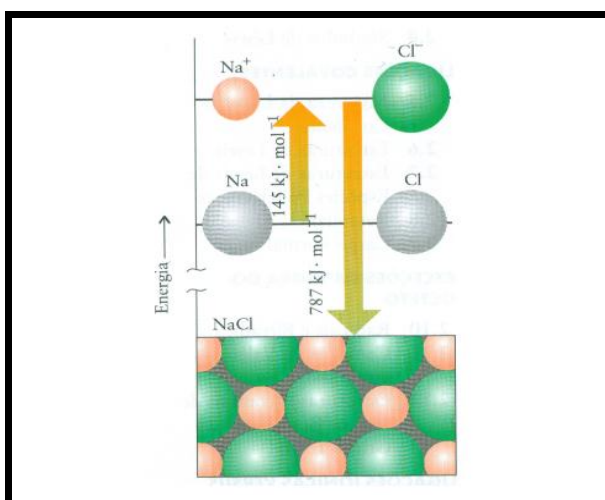


Figura 08: Perfil energético das etapas de formação da ligação no NaCl.

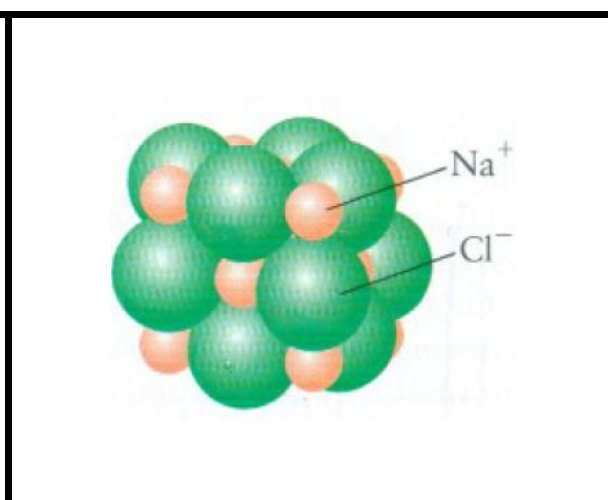


Figura 09: Retículo cristalino do NaCl

Na ligação iônica ficou claro que a ligação entre os átomos ocorria graças à interação eletrostática entre os íons formados, mas o grande desafio era explicar a interação entre os átomos de espécies diatômicas como o N_2 , por exemplo, já que nesse caso os dois átomos possuem o mesmo valor de eletronegatividade. Esse desafio continuou perdurando até 1916 quando Lewis propôs que essas espécies se mantinham unidas através de um compartilhamento de elétrons por meio de uma ligação que ele denominou de ligação

covalente. Dessa forma, entende-se que, quando as espécies químicas possuem ambas um alto valor de eletronegatividade, o tipo de interação que mantém essas espécies unidas é a ligação covalente.

3.1.2 Regra do Octeto e ligação covalente

Até o início do século XX acreditava-se que os átomos eram mais estáveis energeticamente ao se ligarem a outros átomos e por isso não eram encontrados na forma isolada na natureza. Até que em 1894 foi descoberto o elemento químico argônio que era um gás monoatômico. Logo os cientistas começaram a discutir porque os átomos desse elemento químico não sofriam combinações com outros átomos, ou seja, eles eram estáveis sem a necessidade de ocorrer a ligação com outros elementos. Com isso esse elemento passou a ser o parâmetro de estabilidade que os demais elementos na natureza tenderiam a alcançar. Observando-se mais a fundo o comportamento desse elemento e de outros que foram descobertos posteriormente que também eram dotados da mesma característica, ficou constatado que a característica comum que esses elementos possuíam era a presença de oito elétrons em sua camada de valência. Pensando nisso, foi proposta a regra do octeto. Essa regra diz que para atingirem um menor estado energético, os átomos devem possuir em sua camada de valência oito elétrons, sendo que o H e o He seriam exceções dessa regra por possuírem apenas a camada K na sua eletrosfera e assim, podem possuir no máximo dois elétrons nessa camada.

A partir da proposta da regra do octeto pôde-se resolver o problema que era encontrado na explicação de como ocorria a ligação entre átomos de um mesmo elemento químico já que os mesmos possuindo um mesmo valor de eletronegatividade, não poderiam ou atrair ou doar os elétrons de sua camada de valência. Essa regra diz que para atingirem um menor estado energético, o átomo deve possuir em sua camada de valência oito elétrons, sendo que o H e o He seriam exceções dessa regra por possuírem apenas a camada K na sua eletrosfera e assim, podem comportar no máximo 2 elétrons nessa camada. Assim, como as espécies não-metálicas possuem uma alta tendência em atrair para as suas eletrosferas elétrons, então elas, entre si, ao invés de atraírem totalmente esses elétrons, optariam por compartilhá-los. Esse compartilhamento ocorre graças a aproximação que permite uma sobreposição parcial das camadas de valências desses átomos, permitindo que os elétrons presentes na interseção dessas camadas sejam compartilhados, caracterizando assim a ligação covalente.

Então, a ligação iônica é uma ligação formada entre espécies que possuem uma um alto valor de eletronegatividade e outra um alto valor de eletropositividade⁹ e essa diferença de valores fazem com que essas espécies se mantenham unidas através de interações eletrostáticas; A ligação covalente ocorre entre átomos com altos valores de eletronegatividade que, devido a essa alta tendência em atrair para a suas eletrosferas esse elétrons, fazem um compartilhamento de elétrons através da sobreposição parcial de suas camadas de valência; A grande pergunta é: Como ocorre então a ligação entre espécies com um alto valor de eletropositividade, ou seja, como ocorre a ligação entre átomos metálicos ?

3.1.3 Ligação metálica

Sabe-se que uma das grandes características observadas nas substâncias metálicas são as suas altas condutibilidades térmicas e elétricas. Uma grande questão é compreender porque essas substâncias possuem essas características enquanto compostos iônicos sólidos e compostos moleculares assim não o possuem. A explicação pode ser encontrada na correta compreensão de como os átomos presentes nas substâncias metálicas estão organizados e como eles estão unidos entre si, ou seja, na ligação metálica.

Os átomos nas substâncias metálicas, assim como nas iônicas, se organizam em retículos cristalinos. Nos retículos cristalinos, os átomos estão empacotados em um padrão regular, ou seja, as posições dos átomos são fixas e seguem um padrão de organização. Esse padrão de organização, aliado ao alto valor de raio atômico que esses átomos possuem, permite que o átomo metálico tenha partes de suas camadas de valência se sobrepondo aos átomos de sua vizinhança, caracterizando assim a ligação metálica. Como essas sobreposições ocorrem nas diversas direções ao redor do átomo, elas acabam por combinarem entre si e formarem uma única sobreposição nas redondezas desses átomos. Os átomos vizinhos sofrem o mesmo fenômeno. Assim é gerado em todo o retículo cristalino do metal uma única camada de valência contendo todos os elétrons das camadas de valências desses metais, permitindo assim que esses elétrons possam fluir por todos retículo cristalino. Mas, ao contrário do que pode ser inferido quando se utiliza o termo “mar de elétrons” na descrição desse modelo, é que eles elétrons só fluem livremente no sistema quando se fornece energia para isso, ou seja, enquanto não é fornecido para o sistema um potencial, esses elétrons permanecem nas

9 Eletropositividade: Também conhecida como Caráter Metálico. É uma propriedade periódica que relaciona a tendência que um átomo possui em perder os seus elétrons. Ela é uma propriedade oposta a eletronegatividade. Essa propriedade está diretamente ligada ao tamanho do raio atômico. Como esses átomos possuem um grande raio atômico, a força de atração que o núcleo exerce sobre a eletrosfera é menor, facilitando assim a perda dos elétrons da camada de valência por esses átomos.

redondezas de seus átomo de origem. O alto valor de condutibilidades térmica e elétrica encontradas nesses materiais se deve ao fato dessas sobreposições parciais de eletrosferas diminuir bastante a energia desses elétrons, permitindo que o mínimo de energia fornecido a esse retículo cristalino seja o suficiente para que esses elétrons consigam fluir sobre todo o sistema.

3.2 Estudo das ligações químicas em uma abordagem quântica

Ao se trabalhar o tema ligações químicas dentro de uma abordagem clássica, o modelo de ligações proposto por Lewis é o grande aparato teórico no desenvolvimento do tema. Em 1916, o cientista Gilbert Lewis em seu artigo “The Atom and the Molecule”¹⁰ através de um modelo de átomo cúbico (FIGURA 10) propõe a disposição dos orbitais eletrônicos ao redor do núcleo e, ainda nesse modelo, os átomos se unem para formarem moléculas através de um emparelhamento de seus elétrons com magnetismos opostos, diminuindo o paramagnetismo dos mesmos (FIGURA 11). Ao final de seu artigo, Lewis propõe uma alteração do modelo cúbico visando à explicação da formação das ligações triplas (FIGURA 12).

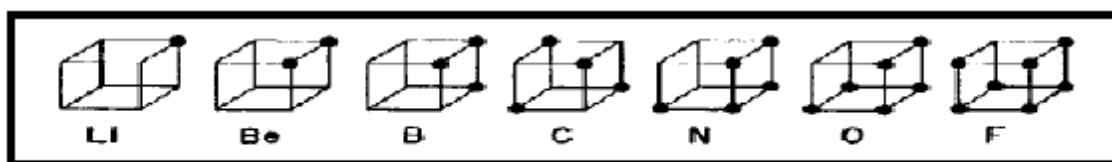


Figura 10 : Modelo do átomo cúbico proposto em 1902, mas não publicado

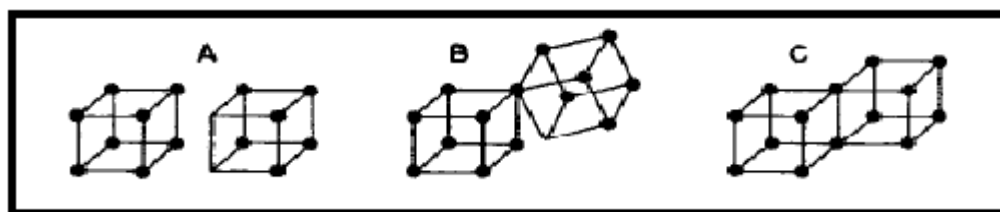
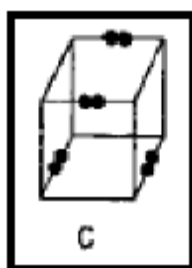


Figura 11 : Esquema representacional de como os elétrons estariam dispostos em uma ligação química

¹⁰ LEWIS, G. N.; *J. Amer. Chem. Soc.* (1916) **38**, 762.



*Figura 12 :
Proposta de
Lewis*

Na época da publicação desse artigo, já se era conhecido o modelo atômico proposto por Bohr e, ambas as teorias, não se ajustavam as leis estabelecidas da física de então (DAVANZO e CHAGAS, 1993). Como a física quântica também se desenvolvia paralelamente a essas pesquisas e conseguia com um grande êxito quantificar algumas características observadas experimentalmente (em especial, questões relacionadas ao átomo de hidrogênio) os cientistas começaram a buscar, com o auxílio da mecânica quântica, uma abordagem quantitativa das ligações químicas já que o modelo de Lewis se mostra muito útil apenas para uma descrição mais qualitativa das ligações (TOMA, 1997). Como a nossa proposta nesse segundo tópico do capítulo é trabalhar os conceitos da ligação metálica dentro de uma abordagem quântica, então iremos a ela.

3.2.1 Teoria de ligação de valência - TLV

A teoria de ligação de valência (TLV) é comumente utilizada na racionalização da ligação química devido a sua fácil abordagem qualitativa. Sabe-se que os elétrons responsáveis pela ligação química são os elétrons da camada de valência devido ao fato de, primeiro, esses elétrons estarem desemparelhados ou então podem ser desemparelhados a um baixo custo energético e, segundo, esses orbitais serem mais difusos, permitindo assim a maior sobreposição dos mesmos (DUARTE, 2001). E, segundo a TLV, as ligações químicas ocorrem devido a sobreposição construtiva de orbitais semi-preenchidos, caracterizando assim que a TLV leva em conta apenas o caráter covalente nas ligações químicas. (MCQUARRIE¹¹, apud. DUARTE, 2001. p.8).

Assim, como os elétrons de valência são facilmente excitados e seus orbitais são mais difusos, ao se aproximarem esses orbitais semi-preenchidos dos diferentes átomos, eles se sobrepõem frontalmente, diminuindo a energia do sistema e formando a ligação química. E,

11 MCQUARRIE, D. A. *Quantum Chemistry*. Mill Valley: University Science Books, 1983.

ainda dentro desse átomos, os seus orbitais de valência podem combinar-se entre si formando o que é conhecido em química como hibridação de orbitais. Tomemos como exemplo o composto BeH_2 . Sabe-se que a distribuição eletrônica do Berilo é $1s^2 2s^2$, o que mostra que em sua camada de valência estariam ainda disponíveis três orbitais para receberem elétrons (p_x , p_y , p_z). Para a formação das duas ligações do Berilo com os átomos de hidrogênio no composto BeH_2 , é necessário que dois orbitais da camada de valência do Berilo estejam semi-preenchidos, sendo assim, um dos elétrons do orbital s é excitado para um orbital p disponível, absorvendo assim uma certa quantidade de energia para essa excitação. Após esse elétron ser excitado e ocupar um orbital p , os dois orbitais, p e s , sofrem uma recombinação entre si, formando um orbital híbrido sp , baixando levemente a energia do sistema, mas ainda com um valor acima do inicial. Depois, esses orbitais se aproximam do orbital do hidrogênio e eles, semi-preenchidos, se sobrepõem formando a ligação e baixando a energia do sistema a um valor abaixo do inicial, sendo favorecido assim energeticamente esse composto (FIGURA 13). Conclui-se então que, para a formação da ligação química, os orbitais atômicos devem ser ajustados para melhor atenderem a sobreposição de orbitais (DUARTE, 2001). Seguindo essa lógica, a medida que os átomos possuem em sua camada de valência orbitais não ocupados disponíveis para serem semi-preenchido com elétrons de orbitais menos energéticos dentro da camada de valência e assim formarem as respectivas ligações, podemos então expandir a teoria do octeto e compreender a existência de compostos como o SF_6 , onde o Enxofre, de distribuição $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$, excita seus elétrons da camada de valência e depois os hibridiza, formando seis orbitais híbridos do tipo sp^3d^2 .

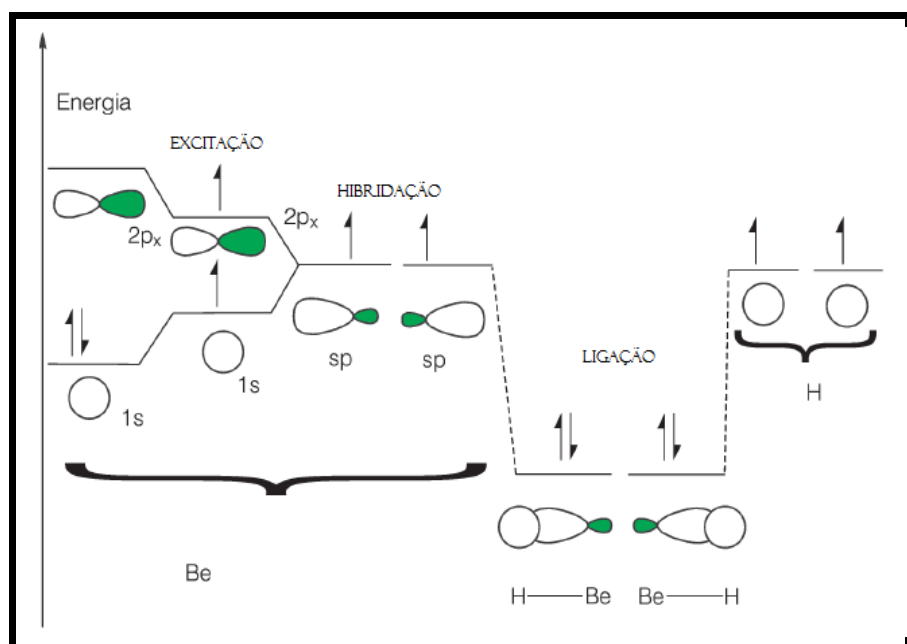


Figura 13: Perfil Energético da formação da ligação química no hidreto de berilo segundo a TLV

3.2.2 Teoria do orbital molecular - TOM

Entendendo-se que dois átomos se unem através de um compartilhamento de elétrons e que para que ocorra esse compartilhamento de elétrons, orbitais são sobrepostos e que, segundo a mecânica quântica, os elétrons possuem um comportamento dual¹², os orbitais atômicos formados na ligação passam a ser representado por funções de onda. O resultado da sobreposição desses orbitais semi-preenchidos (levando-se em conta a característica ondulatória do elétron) é a formação de dois novos orbitais estendidos sobre esses átomos, que são denominados de orbitais moleculares. Os orbitais moleculares de uma molécula AB – isto é, Ψ_{AB} – pode ser descrito por uma combinação linear dos orbitais atômicos localizados em A e em B, respectivamente ($\Psi_{AB} = C_A\Psi_A \pm C_B\Psi_B$) (TOMA, 1997). Especificando isso dentro das ligações metálicas onde os átomos no retículo cristalino são todos iguais, ou seja, $C_A=C_B$, não são gerados Ψ com participação dominante na formação do orbital molecular, ocorrendo um compartilhamento equitativo dos elétrons. As energias envolvidas nessas sobreposições de orbitais são calculadas na mecânica quântica através da conhecido equação de Schrödinger que geram como soluções valores E^+ e E^- de energia, que são associados a

¹² A dualidade onda-partícula foi proposta pela primeira vez por de Broglie em 1924 onde ele anunciou que os elétrons se comportavam simultaneamente como onda e como partícula, dependendo do experimento utilizado.

sobreposições construtivas e destrutivas de orbitais. A sobreposição construtiva gera um reforço na densidade eletrônica entre os núcleos de modo que essa densidade maior aumenta a aproximação dos núcleos, resultando na ligação química. A sobreposição destrutiva desloca a densidade eletrônica para as extremidades opostas da ligação, permitindo uma interação fortemente repulsiva entre os núcleos. Essa teoria que descreve as ligações químicas através da sobreposição de orbitais com a formação de orbitais ligante e anti-ligantes, é conhecida como Teoria do Orbital Molecular (TOM).

A TOM permite expressar a ordem de ligação em termos da metade da diferença entre o número de elétrons ligantes e antiligantes (TOMA, 1997). Sendo assim, a partir dela pode-se prever a existência ou não de prováveis moléculas. Por exemplo, a molécula de H_2 , por possuir dois elétrons no orbital ligante, possui uma ordem de ligação 1, equivalente a uma ligação simples. Já a molécula He_2 não existe pela teoria por possuir dois elétrons em orbitais ligantes e dois no orbital antiligante, gerando assim um ordem de ligação 0 e, por fim, a molécula de He_2^+ existe segundo a TOM por possuir dois elétrons em orbitais ligante e um no orbital antiligante, gerando uma ordem de ligação $\frac{1}{2}$. A força com que as ligações químicas irão ocorrer depende da forma de interação entre os dois orbitais envolvidos. Essa energia é conhecida como energia de ressonância. Orbitais de tamanhos similares permitem sobreposições mais efetivas, gerando ligações mais fortes.

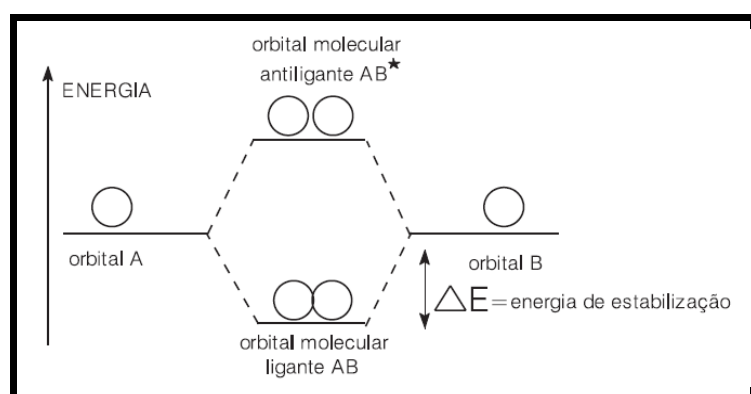


FIGURA 14: Representação de um diagrama de orbitais moleculares

3.2.3 Ligação Metálica – Teoria de bandas

Sabe-se que em substâncias metálicas, os átomos constituintes são todos iguais, o fator eletronegatividade não influi no caráter da ligação e que os metais se organizam em retículos

cristalinos. A TOM também permite um formalismo que explique como ocorrem as ligações nesses compostos. A grande diferença da aplicação da TOM nesse caso é que ao invés de se tratar da combinação de orbitais de apenas uma molécula diatômica (H_2 , por exemplo) agora o formalismo é estendido a uma rede cristalina de N espécies atômicas. Como a organização espacial em substâncias metálicas ocorrem de forma bem simétrica sob uma rede cristalina, então as sobreposições entre os orbitais dessas espécies ocorrem de uma forma bem efetiva, permitindo a combinação dos orbitais das N espécies presentes na rede. Com a combinação de um número muito grande de orbitais de energia muito próximas, fica um pouco complicado a distinção de cada um desses orbitais combinados formados, por isso, passa-se a tratar não de um número grande e sim de uma banda de orbitais, ou seja, como se houvesse um contínuo de estados eletrônicos possíveis para o elétron (DUARTE, 2001).

Assim, com a ocorrência de sobreposições fortes entre as bandas fazem com que a promoção do elétron do orbital HOMO para o LUMO¹³ ocorra a um custo mínimo de energia (aproximadamente zero). Em metais alcalinos e alcalinos terrosos, a banda mais alta de energia é chamada de banda s por ser constituída basicamente dos elétrons da camada s de valência dos átomos. Para metais de transição, essa banda recebe o nome de banda d pelo mesmo motivo. A banda formada pelos orbitais LUMO é conhecida como lacuna de energia (do inglês, *energy gap*). É o tamanho dessa lacuna que define se um material é um condutor, semi-condutor ou um não-condutor, ou seja, o tamanho da lacuna é diretamente proporcional a condutividade do material.

O limite de separação entre banda de valência (HOMO) e a banda de condução (LUMO) é denominada de *nível de Fermi* sendo ele um nível de ocupação bem-definido e é através desse nível que se pode estabelecer, por exemplo, energia de ionização de metais.

13 Em TOM, HOMO e LUMO são siglas originadas do inglês que significam, respectivamente, orbital molecular ocupado de maior energia e orbital molecular não ocupado de menor energia. (ATKINS e JONES, 2006)

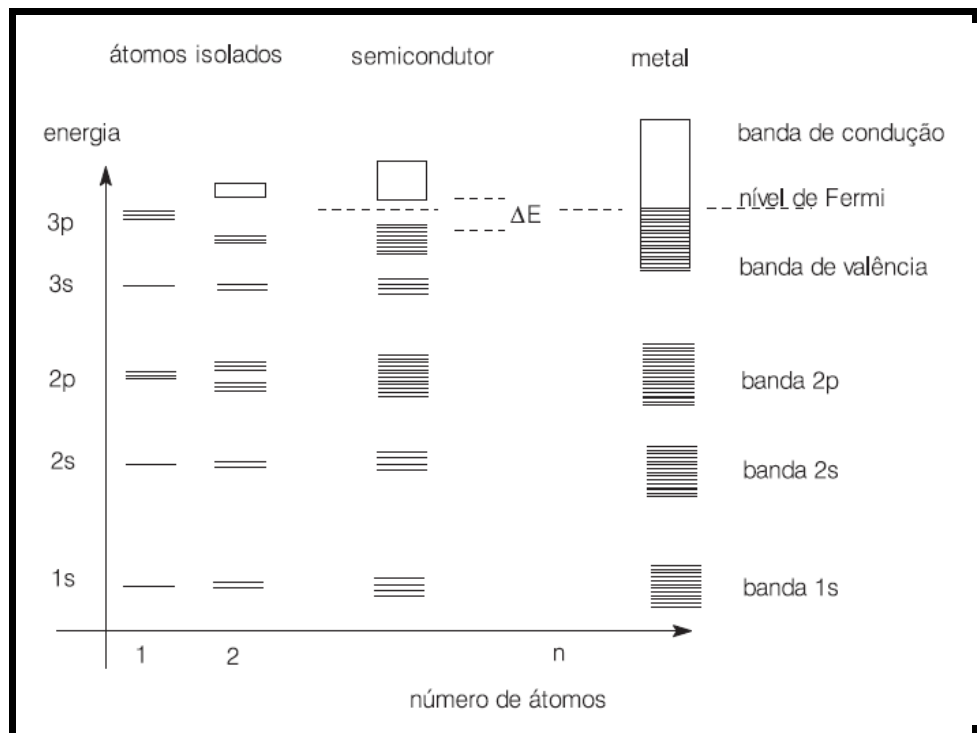


FIGURA 16: Extensão dos orbitais moleculares nos diferentes tipos de compostos

Essa teoria pode ser estendida, não ficando apenas restrita às substâncias metálicas. A condução elétrica observada em substâncias não-metálicas difere da condução dos metais devido ao nível de Fermi possuir um maior valor, sendo necessário uma quantidade maior de energia para permitir a promoção dos elétrons nessas substâncias se comparados aos substâncias metálicas. Outra diferença encontrada é em relação ao aumento de temperatura que, em substâncias semicondutores aumenta a condutividade elétrica devido estar disponível no sistema uma maior quantidade de energia que facilita a promoção dos elétrons e nos metais esse aumento de temperatura tem efeito contrário devido ao aumento da entropia do sistema, diminuindo as sobreposições efetivas dos orbitais, dificultando a formação das bandas de condução.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho objetivou trazer um esclarecimento para professores sobre o tema ligações metálicas, que pouco é trabalhado em sua formação acadêmica. O nosso grande objetivo neste trabalho foi a busca pela ruptura da utilização da analogia “mar de elétrons” nessa abordagem. Conforme o trabalho de Tarber (2002) apresentado aqui, pudemos observar o quão confuso fica a compreensão dos alunos da ligação metálica, gerando inúmeras interpretações do tema e algumas dessas interpretações bastante distantes do que realmente ocorre.

Sendo assim, a correta modelagem no ensino de Química (JUSTI, 2010), é de sumária importância na construção dos conceitos por parte dos alunos já que esta tem como objetivo simplificar entidades mais complicadas que, no universo do ensino de química, encontram-se no nível do abstrato.

Outro fator importante que também auxilia no entendimento correto das ligações químicas apresentada neste trabalho foi a evolução histórica da compreensão das ligações químicas por parte dos cientistas. Quando se busca uma abordagem histórica prévia dentro do ensino de ciência, a modelagem fica facilitada devido a abordagem histórica trazer com si uma evolução da complexidade do modelo e, por consequência, a construção paulatina e mais detalhada dos conceitos a ele relacionado.

Sendo assim, buscamos em nosso trabalho duas formas de abordagem do tema ligações metálicas para fornecer aos professores de ensino médio novas ferramentas na abordagem do tema ligações químicas. A utilização da analogia “mar de elétrons”, devido a comodidade de sua abordagem frente a teoria de bandas, acaba por ser amplamente utilizada por professores e até por livros didático.. Acreditamos que a abordagem da teoria de bandas no ensino médio não fica algo distante da realidade dos alunos, desde que as ligações iônicas e covalentes sejam trabalhadas de forma correta e detalhada por parte dos professores e por isso, incluímos em nosso trabalho uma abordagem clássica que seria a abordagem mais próxima da realidade desses alunos. Na segunda abordagem, a abordagem quântica, visamos aprofundar o tema para que os professores tivessem uma compreensão mais profunda e ao mesmo tempo mais simplificada do tema. Optamos dentro dessa abordagem apresentar o

mínimo da parte matemática da mecânica quântica, ou seja, uma abordagem mais qualitativa para que assim o tema fosse aprofundado e simplificado simultaneamente.

Por fim, ficamos satisfeitos com os resultados apresentados neste trabalho. A pesquisa bibliográfica feita por nós nos mostrou que esse tema ainda pode render outros trabalhos futuros e outras abordagens, como um fato observado por nós durante essa pesquisa. Alguns livros de ensino superior apresentaram em sua abordagem a analogia “mar de elétrons”. Então, esperamos que esse trabalho possa ser uma útil ferramenta não só para professores de Química como também para futuros trabalhos dentro do mesmo tema.

O que ficou evidenciado neste trabalho é a grande necessidade de se continuar os estudos dentro do tema. A forma como as ligações metálicas ainda são abordadas de forma incorreta em livros didáticos não só do ensino médio, como também do ensino superior, mostra o quão confuso está o conceito de ligações metálicas dentro da comunidade científica.

REFERÊNCIAS

- ATKINS, P.; JONES, L.; Princípios de Química: Questionando a vida moderna e o meio ambiente. 3ª Edição. Porto Alegre: Bookman, 2006.
- BASSALO, J.M.F.; A Crônica da Física do Estado Sólido: II. Teoria dos Metais. In: Revista Brasileira de Ensino de Física, vol.15, nº1-4, p.139-152, 1993.
- BASSALO, J.M.F.: A Crônica da Física do Estado Sólido: III. Teoria de Bandas. In: Revista Brasileira de Ensino de Física, vol.16, nº1-4, p.63-75, 1994.
- BEZERRA, A.S; SILVA, R.R.; Ligações Química: As primeiras teorias. 2001.
- CHAGAS, A. P. ; AIROLDI, C.; Os Livros Textos e Alguns Aspectos da Ligação Química. In: Química Nova, v.06, 1983.
- COTTON, F. A.; WILKISON, G.; GAUS, P.L.; Basic Inorganic Chemistry, Second Edition, Canada, 1987, p.233-235.
- DAVANZO, C. U.; CHAGAS, A. P.; Gilbert Newton Lewis e a Revolução dos Pares Eletrônicos. In: Química Nova, n.6, vol.02, 1993.
- DUARTE, H. A.; Ligação Iônica, Covalente e Metálica. In: Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola, n.04, 2001
- FERNANDEZ, C.; MARCONDES, M.E.R.; Concepção dos Estudantes Sobre Ligação Química. In: Química Nova na Escola, n.24, 2006.
- HOUSECROFT, C.E.; SHARPE, A. G.; Inorganic Chemistry, First Edition. Pretice Hall, England, 2001. p. 116, 125-127.
- JUNIOR, O. P.; A Representação Pictórica de Entidades Quânticas da Química. In: Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola, n.7, 2007.

JUSTI, R. Modelo e Modelagem no Ensino de Química: Um olhar sobre aspectos essenciais pouco discutidos. In: SANTOS, W.L.P; MALDANER, O.A; *Ensino de Química em Foco*, Injuí, 2010, p.210-230.

LEE, J. D.; Fundamentos de Química Inorgânica. 1ª Edição. Editora Edgard Blucher. São Paulo, 1971. p.12-13.

LEE, J. D.; Química Inorgânica não tão Concisa. 5ª Edição. Editora Edgard Blucher, São Paulo, 1999. p. 65-67.

MAHAN, B. H.; Química, Um Curso Universitário. 2ª Edição, revisada. Editora Edgard Blucher, São Paulo, 1976. p. 383-386.

MOELLER, T.; Inorganic Chemistry and Advanced Textbook. New York, 1965. p. 225-226.

OKI, M. C. M.; A Eletricidade e a Química. In: Química Nova na Escola. n.12, 2000

PARKER, G. D.; PHIL, D.; Modern Inorganic Chemistry. Longmans. Great Britain, 1967

SANTOS, S. E.; DELGADO, R. N.; Química General. Tomo I, 5ª Edición. Impresos y Revistas. Madrid, 1991. p.289-292.

SANTOS, W.; MÓL, G.; Química Cidadã, Vol. 3, 1ª edição. Editora Nova geração. São Paulo 2010.

SLABAUCH, W.; PARSONS, T. D.; Química Geral, Edição revisada e atualizada. Editora Livros Técnicos e Científicos. Rio de Janeiro, 1975. p.138

TARBER, K.S.; Mediating Mental Models of Metals: Acknowledging the Priority of the Learner's Prior Learning. Science Education p.732-758, 2002.

TOMA, H. E; Ligação Química: Abordagem Clássica ou Quântica? In: Química Nova na Escola, n.6, 1997.

ZUMDAHL, S. S.; Chemical Principles. Second Edition. Heath. Toronto, 1995. p. 742-747.