

A molécula de ozônio: o que os livros de Química Geral (não) dizem

Luciano T. Costa (PQ)¹, João Gobbo (PG)², Bruno C. Bertoldo (IC)*¹, Dirlane F. do Carmo (PQ)³ e Dalva L. A. de Faria (PQ)² *brunodecastro_vga@yahoo.com.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas. ²Laboratório de Espectroscopia Molecular, Instituto de Química, Universidade de São Paulo ³Universidade Federal Fluminense.

Palavras Chave: Ozônio, momento de dipolo, livros didáticos.

Introdução

O ozônio é uma molécula homonuclear de simetria C_{2v} , cujo momento de dipolo é diferente de zero e cujo simples modelo VSEPR é capaz de prever. Mas os livros assim o descrevem? E será que o descrevem de forma correta?

Nesse sentido, este trabalho tem por objetivo preencher uma lacuna existente nos livros didáticos sobre a estrutura eletrônica e propriedades da molécula de ozônio por meio de cálculos *ab initio* e da análise crítica de livros didáticos de Química Geral. Para isto, uma metodologia de análise de textos escolares proposta por Caldas e Saltiel¹ foi adaptada e aplicada.

Resultados e Discussão

Cálculos de primeiros princípios

Na tabela 1 encontram-se os valores de algumas propriedades do ozônio obtidas utilizando-se o nível de teoria B3LYP/6-31G(d,p).

Tabela 1. Algumas propriedades do ozônio.

Propriedade	B3LYP	Exp. ²
Ângulo de ligação / °	117,92	116,8
Momento de dipolo / D	0,62	0,53
Carga no átomo central* / u.e.	+0,23	+0,16

* obtida a partir do momento de dipolo, já que não é possível mensurar diretamente a carga sobre o átomo central².

Análise dos livros didáticos

Para simplificação, os livros analisados foram designados pelas letras A³, B⁴, C⁵, D⁶, E⁷ e F⁸.

O momento de dipolo da molécula de ozônio foi abordado somente pelos livros A e E de forma resumida mas enfatizando a geometria molecular. Os demais livros no entanto, lançam mão do conceito de eletronegatividade para justificar o momento de dipolo de moléculas, o que fragiliza a compreensão da polaridade do ozônio, pois vista por esse lado, não haveria diferença de eletronegatividade entre átomos de um mesmo elemento. Essa generalização quando estendida ao O₃, pode reforçar um possível pensamento de que trata-se de uma molécula apolar uma vez que a

35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

teoria em questão é colocada nesses livros como uma verdade universal, sem discutir suas limitações.

Com exceção do livro B, todos os autores utilizam a molécula de ozônio para exemplificar o tópico referente ao conceito de estruturas de ressonância. Neles, são encontrados apenas os dois contribuintes principais:

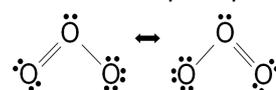


Figura 1. Estruturas de ressonância encontradas em alguns livros didáticos.

Na segunda metade do último século, Gould e Linnet⁹ apresentam um trabalho sobre a estrutura eletrônica do ozônio, fazendo uso da teoria de ligação de valência e teoria do orbital molecular, aplicadas no estudo de O₃²⁺, O₃⁺ e O₃, colocando-se contrários à estrutura de ressonância da Fig 1. o que mais tarde é descrito por Goddard et al.¹⁰, como sendo uma interação fraca de elétrons π entre os átomos de oxigênio terminais.

Conclusões

Quase todos os livros utilizam o ozônio como exemplo em estruturas de ressonância, uma teoria cuja aplicação à essa molécula ainda não está completamente consolidada. Além disso, alguns autores perdem a oportunidade de explorar o ozônio quando o assunto é polaridade de moléculas, limitando-se a uma teoria centrada no conceito de eletronegatividade, que não se aplica ao O₃ e por isso, deveria ter suas limitações discutidas. Os livros A e E são os que melhor descrevem o ozônio.

Agradecimentos

FAPEMIG, UNIFAL-MG.

¹ Caldas, H.; Saltiel, E.; *Revista Portuguesa de Educação* **2001**, *14*(1), 215 - 237.

² Purser, G.H.; *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 1014.

³ Atkins, P.; Jones, L.; *Princípios de Química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*, Porto Alegre: Bookman, 2001.

⁴ Brady, A.E.; Russell, J.W.; Holum, J.R.; *Química: A matéria e suas transformações*, 3ª Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.

⁵ Brown, T.L.; Lemay Jr., H.E.; Bursten, B.E.; Burdge, J.R.; *Química: a ciência central*, 2ª Ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

⁶ Kotz, J.C.; Treichel Jr., P.M.; *Química Geral e Reações Químicas*, 5ª Ed. São Paulo: Thomson, 2005.

⁷ Mahan, B.M.; Myers, R.J.; *Química: um curso universitário*, 4ª Ed. São Paulo: Edgard Blücher, 1995.

⁸ Russell, J.B.; *Química Geral*, 2ª Ed. São Paulo: Makron Books, 1994.

⁹ Gould, R.D.; Linnett, J.W.; *Faraday Society* **1963**, *34*, 1001.

¹⁰ Hay, P.J.; Dunning Jr., T.H.; Goddard III, W.A.; *J. Chem. Phys.* **1975**, *62*, 3912.