

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

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

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas. <sup>2</sup>Laboratório de Espectroscopia Molecular, Instituto de Química, Universidade de São Paulo <sup>3</sup>Universidade 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 Saltiel<sup>1</sup> 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. <sup>2</sup>
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 central<sup>2</sup>.

#### Análise dos livros didáticos

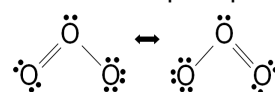
Para simplificação, os livros analisados foram designados pelas letras A<sup>3</sup>, B<sup>4</sup>, C<sup>5</sup>, D<sup>6</sup>, E<sup>7</sup> e F<sup>8</sup>.

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 O<sub>3</sub>, 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 Linnet<sup>9</sup> 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 O<sub>3</sub><sup>2+</sup>, O<sub>3</sub><sup>+</sup> e O<sub>3</sub>, colocando-se contrários à estrutura de ressonância da Fig 1. o que mais tarde é descrito por Goddard et al.<sup>10</sup>, como sendo uma interação fraca de elétrons  $\pi$  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 O<sub>3</sub> e por isso, deveria ter suas limitações discutidas. Os livros A e E são os que melhor descrevem o ozônio.

### Agradecimentos

FAPEMIG, UNIFAL-MG.

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

<sup>2</sup> Purser, G.H.; *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 1014.

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

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

<sup>5</sup> 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.

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

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

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

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

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