

"O FIM DOS ORBITAIS? COMO O LOGE PODE REDEFINIR O QUE SABEMOS SOBRE ESTE CONCEITO".

VII Congresso Online Nacional de Química, 7ª edição, de 23/06/2025 a 25/06/2025
ISBN dos Anais: 978-65-5465-148-6
DOI: 10.54265/ONHM6268

SILVA; Marco Aurélio de Sobral¹

RESUMO

A Teoria do Loge representa um grande avanço do racionalismo aplicado na integração do conceito de ligação química numa estrutura lógico-matemática. Num breve contexto histórico, essa teoria surgiu de uma aparente contradição entre as linguagens dos químicos e dos físicos. Na visão dos químicos, influenciada por G.N. Lewis, que distinguia entre elétrons de valência e elétrons da eletrosfera, localizando-os em ligações específicas (como elétrons σ , π , etc.). Por outro lado, a visão dos físicos quânticos, baseada na equação de onda e no princípio de Pauli, trata os elétrons como indistinguíveis e deslocalizados. Deste modo, objetiva-se delimitar o tema, focando na Teoria do Loge e sua relação com o conceito de orbital no ensino de química. Começando pela origem da contradição entre a Química e a Física Quântica na abordagem Química Clássica, os químicos tradicionalmente individualizam e rotulam elétrons de duas maneiras: os elétrons de valência associados a ligações específicas e os elétrons da eletrosfera (K, L, etc.), considerados inertes. Essa visão é corpuscular, enfatizando a localização espacial. Já na abordagem da Mecânica Quântica, os físicos trabalham com as funções de onda (Ψ), que descrevem elétrons como ondas probabilísticas e a indistinguibilidade quântica, considerando-os idênticos; não faz sentido atribuir "nomes" aos elétrons. Considerando que o Princípio de Pauli restringe a simetria da função de onda, impedindo localizações arbitrárias, cria-se um paradoxo de como falar em "elétrons de ligação" se a função de onda os trata como não-localizados. A metodologia envolveu a seleção de fontes primárias buscando artigos científicos, livros e teses que abordem a Teoria do Loge, a evolução do conceito de orbital e críticas ao modelo tradicional. Consulta a bases de dados utilizou plataformas como Google Scholar com as palavras-chave: Orbital, Teoria do Loge. Além de uma análise histórica revisando a origem da contradição entre a visão química (Lewis) e a física quântica (funções de onda), destacando a necessidade de reconciliação. Na discursão do exposto, a formalização matemática divide os espaços em volumes desconectados, cobrindo toda a molécula, calcula as distribuições eletrônicas possíveis nessas regiões e maximiza a informação para determinar a melhor partição, resultando numa melhor configuração e definindo os *loges* ideais, ou seja, um *loge de ligação* com alta probabilidade de 2 elétrons. Isto implica para uma ligação química as necessidades repetidas mostrando 2 elétrons no *loge* de ligação (em média) e a contingência de qualquer par de elétrons poder ocupar o *loge* (indistinguibilidade), fomentando então a ligação química como uma região espacial, não um par específico de elétrons. Concluindo, a Teoria do Loge é

¹ UFRPE, marcoaurelioquimica@hotmail.com

uma união entre observação, ação e pensamento, integrando empirismo químico (ligações localizadas), rigor quântico (indistinguidade e funções de onda) e filosofia da ciência (epistemologia do "conhecimento relativo-absoluto"). Por isto, a Teoria do Loge não apenas resolve um paradoxo teórico, mas também amplia o poder heurístico da química em gerar novas descobertas, reforçando seu status como ciência fundamental.

PALAVRAS-CHAVE: Ensino da química, Orbital, Teoria do Loge