

complete precipitation of the product). The product was then filtered, using a No. 3 glass frit, washed with diethyl ether (2 x 30 ml), and dried *in vacuo* to yield $[\text{Ph}_3\text{PCH}_2\text{C}(\text{O})\text{Ph}]\text{Br}$, (16.3g, 35.3 mmol, 93%, $M = 461.34$). M.P. 268-270°C. I.R. (KBr): 1645 cm^{-1} , s, (ν C=O).

Preparation of $[\text{Ph}_3\text{PCH}_2\text{C}(\text{O})\text{Ph}]$.

This experiment was carried out at room temperature under an air atmosphere. A mixture of 10% aqueous Na_2CO_3 (250 ml) and $[\text{Ph}_3\text{PCH}_2\text{C}(\text{O})\text{Ph}]\text{Br}$ (10.0g, 21.7 mmol) were stirred overnight in a 500 ml round-bottomed flask. The resulting suspension was filtered through a No. 3 glass frit to leave a white solid on the frit. This solid was dissolved directly into another 500 ml round-bottomed flask by washing with hot toluene (150 mL). Addition of pentane to this resulting solution afforded the ylide as a white precipitate which was filtered, washed with pentane (2 x 30 ml) and dried *in vacuo*. The yield was approximately 90%, (7.4g, 19.4 mmol, $M = 380.43$). M.P. 178-180°C. I.R. (KBr): 1515 cm^{-1} , s, (ν C=O). $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ (toluene-benzene d_6), δ 17.7, singlet.

Preparation of $[\text{Ni}(\text{Ph})\{\text{Ph}_2\text{PCHC}(\text{O})\text{Ph}\}(\text{PPh}_3)]$ (I)

This section of the experiment should also be performed under an argon atmosphere and all solvents should be dried and distilled prior to use. Using a 250 ml round-bottomed flask, equipped with a side-arm tap and magnetic stirring bar, PPh_3 , (5.0 g, 19.1 mmol) and $[\text{Ph}_3\text{PCHC}(\text{O})\text{Ph}]$, (7.3g, 19.1 mmol) were dissolved in toluene (150 ml). This solution was then added dropwise to a solution of $\text{Ni}(\text{COD})_2$ (5.3g, 19.1 mmol), in toluene (80 ml), in a 500 ml round-bottomed flask maintained at 0°C in an ice bath. This mixture was then stirred at room temperature for 24 hours and then for a further 2 hours at 50°C. The red-brown solution obtained was then evaporated to dryness in order to remove the liberated COD. The residue was redissolved in 40-50 ml of toluene, filtered and hexane (50 ml) added slowly to the

filtrate. Upon storage at 0°C, the product precipitated in the form of yellow-green crystals, which were washed with hexane (2 x 30 mmol) and dried *in vacuo*, to yield $[\text{Ni}(\text{Ph})\{\text{Ph}_2\text{PCHC}(\text{O})\text{Ph}\}(\text{PPh}_3)]$, (9.1g, 13.8 mmol, 68%, $M = 701.43$). M.P. = 268-270°C dec. I.R. (KBr): 1506 cm^{-1} , s, (ν (C—O) + ν (C=C)). ^1H NMR (CDCl_3): δ 5.0 (s, ^1H , PCH), 6.4-8.0 (35H, H aromatic). $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (C_6D_6): δ 20.8 and 22.3 (4 line AB spin system, $^2J_{\text{A-B}} = 272$ Hz).

LITERATURE CITED

- Keim, W.; Kowaldt, F.H.; Compendium 78/79, Supplement to *Erdöl und Kohle, Erdgas, Petrochemie* 453.
- Beach, D.L.; Harrison, J.J.; *U.S. Pat.*, 4 293 727 to Gulf Research and Development Co., C.A. 96:85031
- Nelson, S.M.; Shepherd, T.M.; *J. Chem. Soc.* (1965) 3276.
- Colquhoun, H.M.; Holton, J.; Thompson, D.J.; Twigg, M.V.; *New Pathways for Organic Synthesis*, Plenum, New York (1982) p. 389 and references therein.
- Ramirez, F.; Dehrshowitz, S.; *J. Org. Chem.* (1957) 22, 41.
- (a) Keim, W.; Kowaldt, F.H.; Goddard, R.; Krüger, C.; *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* (1978) 17, 466. (b) Keim, W.; Behr, A.; Gruber, B.; Hoffmann B.; Kowaldt, F.H.; Kürschner, U.; Limbäcker, B.; Sistig, F.P.; *Organometallics* (1986) 5, 2356.
- Pommer, H.; Thieme, P.C.; *Topics in Current Chemistry*, (1983) 109, 165
- Ostoja Starzewki, K.A.; Witte, J.; *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* (1987) 26, 63.

EDUCAÇÃO

“REAVIAÇÃO DE UM CONHECIDO MODELO PARA DETERMINAR A GEOMETRIA MOLECULAR. O EXEMPLO DA H_2O ”.

Angela Ramalho Custodio e Rogério Custodio

Instituto de Química — UNICAMP — C. Postal 6154; 13081-Campinas (SP).

Recebido em 19/8/87

ABSTRACT

The directional character of p atomic orbitals has

been used, in qualitative model, to justify the bent geometry of molecular systems such as H_2O . In this work calculations (ab-initio with STO-3G basis set) were ma-

de to investigate the validity of this model. Without considering hybridization the H_2O molecule presents a linear geometry. Populational analysis and energy partition suggest that the bent geometry of H_2O may be attributed to the minimization of the electronic repulsion energy and not to the maximum overlap criterium between atomic orbitals as suggested.

RESUMO

O caráter direcional dos orbitais atômicos p tem sido empregado em modelos qualitativos para justificar a geometria molecular angular de sistemas como H_2O . Neste trabalho cálculos (ab-initio com funções de base STO-3G) foram efetuados para avaliar a validade destes modelos. Sem considerar o efeito de hibridização das moléculas de H_2O apresentou uma geometria linear. Análise populacional e partições de energia sugerem que a geometria molecular da H_2O pode ser atribuída a minimização da energia de repulsão eletrônica e não ao critério de máximo recobrimento entre orbitais atômicos como sugerido.

1. INTRODUÇÃO

Antes de se introduzir o conceito de hibridização, encontra-se em livros texto de química /1—3/ uma tentativa de explicar a geometria molecular através do caráter direcional dos orbitais p. A molécula de H_2O , freqüentemente tomada como exemplo, tem sua geometria grosseiramente explicada através da mistura de dois orbitais 2p do átomo de oxigênio com um orbital 1s em cada átomo de hidrogênio. Assumindo que o átomo de oxigênio está em seu estado fundamental, sua configuração eletrônica é representada como $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$. Os elétrons desemparelhados nos orbitais p_y e p_z são utilizados para formar duas ligações químicas com os elétrons desemparelhados dos orbitais 1s dos átomos de hidrogênio. O máximo recobrimento entre os orbitais atômicos do oxigênio e dos hidrogênios se dá quando o ângulo de ligação é 90° . Uma vez que os átomos de hidrogênio repelem-se mutuamente, considera-se que o ângulo de ligação deve ser ligeiramente maior do que 90° .

McWeeny /4/ procurou justificar esta hipótese através da aplicação da teoria de orbitais moleculares quantitativamente. A estabilidade angular da molécula de H_2O a 90° foi conseguida efetuando-se uma série de aproximações no modelo matemático, tais como: desprezar todas as integrais de recobrimento, todos os efeitos de interação eletrônica e repulsão nuclear. Estas hipóteses não sofreram avaliação quantitativa. Nosso objetivo neste trabalho consistirá em investigar a validade deste modelo através de cálculos mecânico-quânticos rigorosos.

2. MÉTODO

O quadro qualitativo descrito acima está associado à utilização de orbitais moleculares localizados. Embora seja desejável a utilização destes orbitais para a análise quantitativa do modelo, elas não são necessários. Pode-se analisá-lo através de cálculos utilizando orbitais moleculares não-localizados. Os dois tipos de orbitais são matematicamente equivalentes /4/ e todas as propriedades globais moleculares, tais como, densidade de carga, energia total, energia cinética total, etc. são independentes do tipo de orbitais moleculares, localizados ou não-localizados, que estamos utilizando. Sendo assim, realizou-se este estudo utilizando cálculos rigorosos através da teoria do orbital molecular com orbitais moleculares não-localizados (método ab-initio Hartree-Fock-Roothaan com funções de base STO-6G /5/) para a molécula de H_2O .

A molécula de H_2O está orientada com o átomo de oxigênio no centro do sistema de coordenadas e os dois átomos de hidrogênio equidistantes do átomo de oxigênio, localizados no plano y-z formando um ângulo θ entre as ligações. O comprimento de ligação foi fixado no valor experimental de $0,957\text{\AA}$.

Utilizou-se dois conjuntos de funções de base ("orbitais atômicos") para cálculos. O primeiro considerando apenas os orbitais ($2p_x$, $2p_y$, $2p_z$) sobre o átomo de oxigênio e um orbital 1s em cada átomo de hidrogênio. Os elétrons dos orbitais do tipo s do oxigênio foram considerados como cargas pontuais, ou seja, estes orbitais foram excluídos do cálculo e a carga nuclear efetiva do átomo de oxigênio tornou-se sua carga nuclear menos o número de elétrons existentes nos orbitais 1s e 2s. No segundo conjunto de orbitais atômicos incluiu-se os orbitais 1s e 2s sobre o oxigênio.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O ângulo de equilíbrio obtido para a molécula de H_2O utilizando apenas orbitais p sobre o oxigênio foi de 180° . Este resultado está frontalmente contra o previsto pelo antigo modelo. Para compreender as possíveis causas desse resultado, efetuou-se dois tipos de análise: a) avaliar a região de máximo recobrimento e b) partição da energia total.

Para avaliar a região de máximo recobrimento efetuou-se a soma das integrais de recobrimento entre os orbitais p do oxigênio e 1s dos hidrogênios. Na figura 1 observa-se que esta soma é máxima quando o ângulo de ligação é 90° . Entretanto, a simples soma das integrais de recobrimento não é um critério razoável para avaliar a população eletrônica nas ligações. Os orbitais moleculares são obtidos através da mistura de orbitais atômicos. A participação destes orbitais atômicos nos orbitais moleculares é obtida variacionalmente, ou seja, a cada comprimento e ângulo de ligação procura-se os coeficientes de participação dos orbitais atômicos de tal maneira que a energia eletrônica seja mínima. Desta for-

ma, a avaliação da população de recobrimento deve ser efetuada considerando-se os coeficientes de mistura dos orbitais atômicos. Um dos métodos mais populares e que foi utilizado neste trabalho foi o método de Mulliken /6/. Na figura 1 pode-se ver que a população de recobrimento total (linha contínua) apresenta máximo a 180°, contrário à soma das integrais de recobrimento (linha tracejada) que apresenta máximo a 90°. Assim sendo, embora a geometria de equilíbrio calculada rigorosamente seja diferente da prevista pelo antigo modelo, poder-se-ia inferir erroneamente, como veremos abaixo, que o princípio de máximo recobrimento pode ser considerado o fator determinante da geometria molecular.

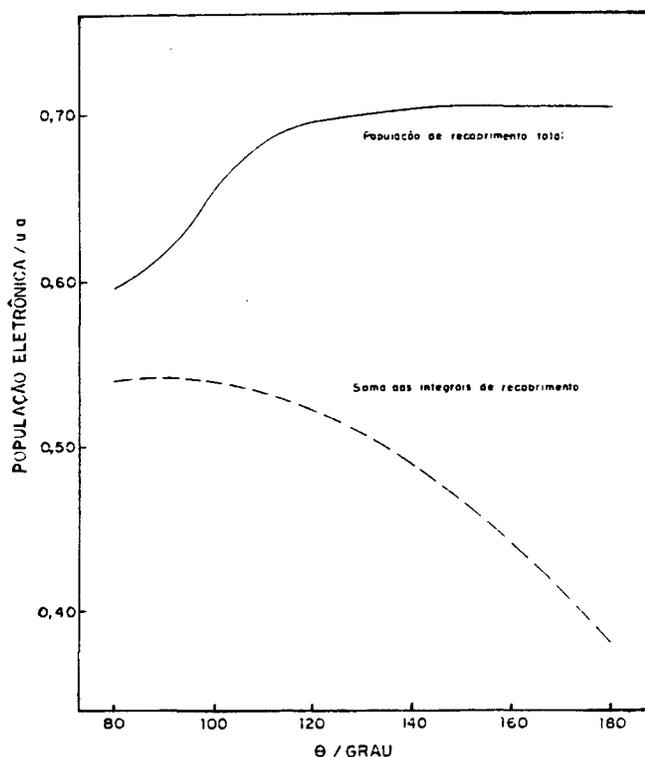


Figura 1. Soma das integrais de recobrimento (---) e população de recobrimento total (—) em função do ângulo de ligação para a molécula de H₂O sem orbitais s sobre o oxigênio em unidades atômicas (u.a.).

A outra análise efetuada foi através da partição da energia total. Considerando a aproximação de Born-Oppenheimer, o mínimo absoluto de uma curva de potencial corresponde à geometria de equilíbrio de um sistema molecular qualquer. Para avaliar-se os efeitos magnéticos que levam uma molécula a adquirir essa geometria podemos efetuar a partição elementar da energia total (E), de acordo com a expressão:

$$E = T + V_{ne} + V_{ee} + V_{nn} \quad (1)$$

onde T representa a energia cinética total e V_{ne}, V_{ee} e V_{nn} as energias potenciais totais de atração nuclear, repulsão eletrônica e repulsão nuclear, respectivamente. Destas componentes, as responsáveis pela tendência ao mínimo de E serão aquelas que apresentarem o mesmo comportamento qualitativo, ou seja, se E apresenta mínimo a 180° as componentes da eq.1 que apresentarem tendências ao mínimo nesse ângulo poderão ser apontadas como as responsáveis pela tendência qualitativa de E. Nos resultados apresentados na tabela 1 vê-se que aumentando-se o ângulo de ligação diminui-se todos os efeitos de repulsão (energias positivas) e de atração (energias negativas). O resultado global observado é que, quando o ângulo de ligação aumenta, a soma das energias repulsivas (T + V_{nn} + V_{ee}) diminui mais significativamente do que a energia de atração (V_{ne}). Em outras palavras, isto quer dizer que o comportamento qualitativo das energias repulsivas é paralelo ao da energia total, enquanto que a energia atrativa possui tendência oposta, ou seja, quando o ângulo de ligação aumenta, a energia total tende ao valor mínimo, da mesma maneira que as energias repulsivas, enquanto que a energia atrativa tende ao valor máximo.

TABELA 1

Energias calculadas para a molécula de H₂O sem orbitais e sobre o átomo de oxigênio (dados em unidades atômicas).

θ	V _{ne} (a)	V _{ee} (b)	V _{nn} (c)	T(d)	(V _{ee} +V _{nn} +T)(e)
180	-26.599	7.710	4.699	8.499	20.908
140	-26.677	7.773	4.717	8.529	21.019
100	-26.996	7.989	4.784	8.688	21.459
80	-27.341	8.174	4.853	8.898	21.925

- (a) Energia potencial de atração nuclear.
- (b) Energia potencial de repulsão eletrônica.
- (c) Energia potencial de repulsão nuclear.
- (d) Energia cinética.
- (e) Energia repulsiva.

Com a finalidade de preservar um quadro físico simples para analisar a natureza destes resultados, pode-se ainda fazer a seguinte consideração: a energia de atração apresenta uma tendência qualitativa oposta ao da energia total. A tendência qualitativa ao mínimo de E deve-se à predominância das energias repulsivas sobre a atrativa. Se considerarmos que T e V_{nn} cancelam parte do efeito atrativo, pode-se dizer que a tendência ao mínimo de E deve-se à minimização da energia de repulsão

eletrônica, Vee. Portanto, pode-se dizer que a geometria da H_2O através deste modelo é linear, pois nessa geometria as repulsões eletrônicas são mínimas.

Estes aspectos energéticos possuem uma semelhança muito grande com o modelo da "Repulsão do Par Eletrônico da Camada de Valência — RPECV" (Valence Shell Electron Pair Repulsion - VSEPR) /7/. Neste modelo considera-se que a geometria de um sistema molecular é determinada pela minimização da repulsão eletrônica entre os elétrons das ligações químicas e dos pares isolados existentes nos átomos que possuam mais de uma ligação, ou seja, aqueles ligados a mais de um átomo. Assim, uma molécula que possua duas ligações químicas e nenhum par isolado sobre o átomo central tenderá a adquirir a geometria linear, pois nessa geometria a repulsão entre os elétrons das ligações é mínima. Em uma molécula que possua duas ligações e um par de elétrons não-ligantes sobre o átomo central observar-se-á um ângulo menor do que 180° , pois com essa geometria a repulsão entre os três pares de elétrons será mínima.

Os resultados calculados mostram que a minimização da energia de repulsão eletrônica pode ser considerada como o fator determinante da geometria obtida, o que coincide com o modelo RPECV. Entretanto, foram considerados os três orbitais $2p$ do oxigênio e os orbitais $1s$ dos hidrogênios, o que totaliza três pares de elétrons, que foram distribuídos em três orbitais moleculares. Se for utilizado qualitativamente o quadro físico dos orbitais localizados, pode-se dizer que dois pares de elétrons formarão duas ligações químicas e o terceiro par será um par isolado (figura 2). Desta forma, a geometria esperada, em princípio, não seria linear, mas sim aquela que minimizasse a repulsão eletrônica entre os três pares de elétrons, ou seja, um ângulo de ligação menor do que 180° . A solução deste problema pode ser visualizada através da figura 2. Como não se considerou a participação dos orbitais do tipo s sobre o oxigênio, o par isolado estará localizado sobre o orbital $2p_x$ do oxigênio. Por estar perpendicular ao plano da molécula, o orbital

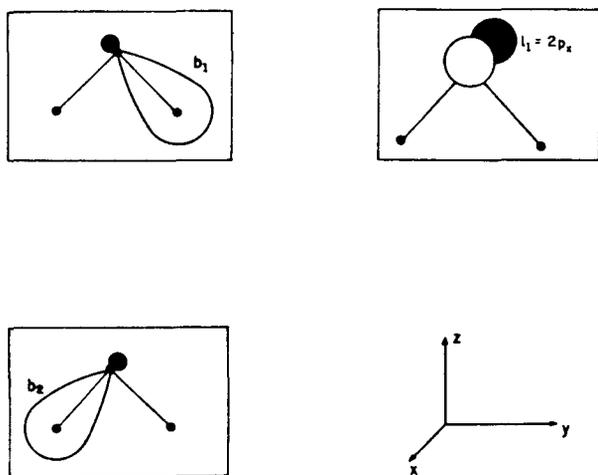


Figura 2. Orbitais localizados ocupados para a molécula de H_2O sem orbitais s sobre o oxigênio.

$2p_x$ não sofre mistura com nenhum dos outros orbitais atômicos quando mudamos o ângulo de ligação, ou seja, o centro de carga deste orbital permanecerá sempre sobre o oxigênio, independente do ângulo de ligação. Desta maneira, a mínima repulsão entre os pares de elétrons será determinada pela maior distância dos elétrons de ligação, uma vez que a distância entre o par isolado e os elétrons de ligação pode ser considerada como independente do ângulo de ligação.

Pictoricamente, pode-se representar esta situação como sendo idêntica à de três cargas distribuídas em uma circunferência (figura 3). Na figura 3a temos duas cargas localizadas sobre a circunferência e uma carga sobre o centro. A carga central estará sempre equidistante das cargas na circunferência, logo a máxima distância entre elas será determinada pelas cargas externas. A figura 3b mostra que a maior distância, ou seja, a menor repulsão entre as três cargas sobre a circunferência será em um ângulo menor do que 180° . A situação apresentada através dos cálculos ab-initio corresponde à situação demonstrada pela figura 3a. A outra figura corresponde à situação em que se considera a inclusão de orbitais s sobre o oxigênio, ou seja, admite-se o efeito de hibridiza-

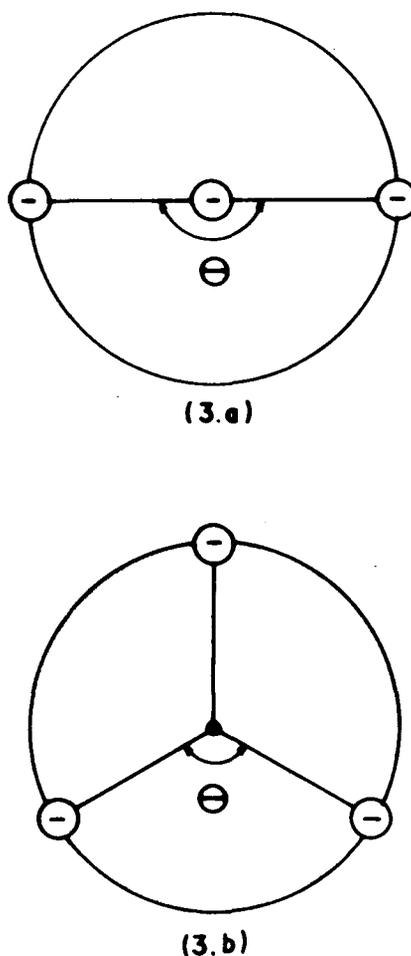


Figura 3. Duas possibilidades de distribuir três cargas iguais em uma superfície.

ção. A inclusão do efeito de hibridização deslocará o centro de carga de cima do átomo central. Estas informações demonstram que na construção de modelos para prever a geometria molecular, não basta apenas considerar-se efetivamente a presença dos pares isolados, ou não-ligantes, como sugere o modelo RPECV, mas deve-se ter a preocupação de considerar-se que o centro de carga dos pares isolados não deve permanecer fixo sobre o átomo central. Esta informação justifica o fato de alguns métodos simples para determinar-se ângulos de ligação quantitativamente funcionarem tão bem /8,9/.

Para efeito de comparação efetuamos cálculos para a molécula de água com todos os orbitais atômicos sobre o oxigênio. O ângulo de ligação de equilíbrio calculado foi de 100,3°, consideravelmente próximo ao valor experimental de 104,5°. A diferença entre os dois resultados deve-se, entre outras coisas à qualidade das funções utilizadas para representar os orbitais atômicos. A primeira análise, a de população de recobrimento total, revelou que, independente de incluir-se todos os orbitais atômicos sobre o oxigênio, esta continua sendo máxima quando o ângulo de ligação é de 180°. As populações de recobrimento são comumente associadas a uma medida da força da ligação química. Este resultado mostra que

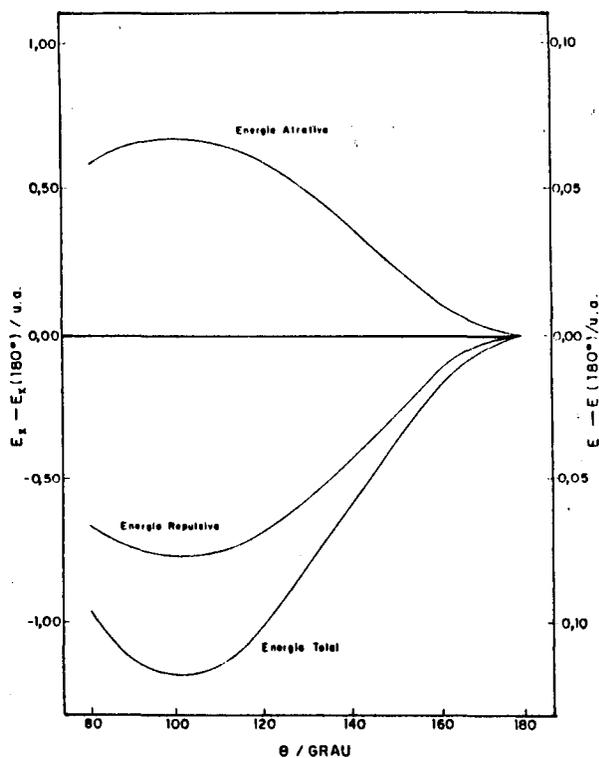


Figura 4. Diagrama de energias relativas para a molécula de H₂O, onde E_x representa as energias atrativas e repulsivas (esquerda) e E a energia total (direita). Energias em unidades atômicas (u.a.).

uma molécula não procura a geometria de equilíbrio com a finalidade de aumentar a força de suas ligações. A análise de partição da energia total da molécula de H₂O (figura 4) revela que a tendência ao mínimo de energia total deve-se principalmente à diminuição das energias repulsivas. A energia atrativa tende a um máximo exatamente quando a energia total tende a um mínimo. Da mesma forma, como analisado para os resultados sem orbitais s sobre o oxigênio, pode-se considerar que a energia de repulsão eletrônica pode ser apontada como a energia que determina o mínimo da energia total (tabela 2).

TABELA 2

Energias repulsivas relativas e energia total relativa para a molécula de H₂O (unidades atômicas).

θ	T(a)	V _{nn} (b)	V _{ee} (c)	E _{total}
180	—	—	—	—
160	0,00600	0,00426	-0,15030	-0,01934
140	-0,00756	0,01774	-0,45167	-0,06216
120	-0,03252	0,04276	-0,70163	-0,10107
100	-0,02216	0,08442	-0,84560	-0,11669
80	0,05931	0,15361	-0,88248	-0,09519

* Energias relativas = $E_x(\theta) - E_x(180^\circ) = \Delta E_x$.

(a) Energia cinética.

(b) Energia potencial de repulsão nuclear.

(c) Energia potencial de repulsão eletrônica.

4. CONCLUSÃO

Através das análises efetuadas pode-se concluir que o caráter direcional dos orbitais p, e conseqüentemente o critério de máximo recobrimento entre os orbitais atômicos, não pode ser apontado como o fator responsável pela geometria molecular.

Para a molécula de H₂O verificou-se que a tendência de mínimo de energia deve-se ao mínimo das energias repulsivas. Pode-se verificar que, neste caso, a energia da geometria de equilíbrio na molécula de água nos dois tipos de cálculos efetuados, considerando-se apenas orbitais p ou considerando-se todos os orbitais atômicos sobre o oxigênio, apontam a energia de repulsão eletrônica como a responsável por essa tendência. Desta forma, verifica-se uma semelhança entre os resultados obtidos e o modelo da Repulsão do Par Eletrônico da Camada de Valência. Este fato não pode ser generalizado. Existem casos onde a energia atrativa determina a geometria de equilíbrio /10/.

Os cálculos efetuados com todos os orbitais atômicos sobre o átomo de oxigênio fornecem a geometria corre-

ta. Estes cálculos incluem os efeitos de hibridização. Desta forma, concluiu-se que sem considerar-se os efeitos de hibridização não é possível obter-se a geometria molecular correta.

5. AGRADECIMENTOS

Gostaríamos de agradecer as sugestões e incentivo recebidos do Dr. Yuji Takahata. Ao Centro de Computação da Universidade Estadual de Campinas pela disponibilidade de tempo computacional dispendido com nossos cálculos. Ao apoio financeiro recebido do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico — CNPq (Proc. n.º 405560/86 - QU - FV).

6. REFERÊNCIAS

¹ Pauling, L.; "The Nature of Chemical Bond", 3th

ed., Cornell University Press, Ithaca, N.Y. (1960) p. 108-111.

² Pimentel, G.C.; Spratley, R.D.; "Chemical Bonding Clarified Through Quantum Mechanics", Holden-Day, San Francisco (1970) p. 162-163.

³ Maron, S.H.; Prutton, C.F.; "Principles of Physical Chemistry", 4th ed., Macmillan Company, New Yor (1967) p. 672-673.

⁴ McWeeny, R.; "Coulson's Valence", 3th ed., Oxford University Press (1979) p. 182-193.

⁵ Stewart, R.F.; *J. Chem. Phys.* (1970) 52, 431.

⁶ Mulliken, R.S.; *J. Chem. Phys.* (1955) 23, 1833, 1841.

⁷ Gillespie, R.J.; *Angew. Chem.* (1967) 10, 819.

⁸ Custodio, R.; Takahata, Y.; *Indian J. Chem.* (1985) 24A, 903.

⁹ Takahata, Y.; Eri, T.; I'Haya, Y.J.; *Chem. Phys. Lett.* (1974) 26, 557.

¹⁰ Orville-Thomas, W.J.; "Internal Rotation in Molecules", John Wiley & Sons, London (1974) p. 403-411.

EDUCAÇÃO

UMA APROXIMAÇÃO ALTERNATIVA AO ENSINO DE MISTURAS LÍQUIDAS BINÁRIAS IDEAIS*

Romeu C. Rocha-Filho e Dácio R. Hartwig

Departamento de Química — UFSCar — C. Postal 676; 13560-São Carlos (SP).

Recebido em 20/12/86; cópia revisada em 28/10/87

RESUMO

Um procedimento alternativo para o ensino do equilíbrio entre misturas líquidas binárias ideais e seus vapores, a uma dada temperatura, é apresentado. Este procedimento leva a uma equação alternativa, cuja existência, em geral, é ignorada nos livros textos. Tal equação permite que se visualize facilmente o papel desempenhado pela composição da fase líquida e pelas volatilidades dos dois líquidos na determinação da composição da fase vapor. O uso de uma aproximação qualitativa, antes da quantitativa, é fortemente advogado.

ABSTRACT

An alternative approach for the teaching of the equilibrium between ideal binary liquid mixtures and their vapors, at a certain temperature, is presented. This procedure leads to an alternative equation whose existence, in general, is ignored in textbooks. Such equation permits the student to readily see which role the liquid-phase composition and the volatilities of the two liquids play in determining the composition of the vapor phase. The use of a qualitative approach, prior to the quantitative one, is strongly advocated.

* Preliminarmente apresentado na 9ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (Curitiba-PR, 1986), durante o 3º Encontro Nacional de Ensino de Química.

INTRODUÇÃO

O estabelecimento de uma relação entre a composição