UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Física

Instituto de Química

Instituto de Biociências

Faculdade de Educação

JOÃO MESSIAS JÚNIOR

**Análise da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares presente
em um livro didático de ensino superior: obtenção e análise de redes
conceituais e identificação de fatos, conceitos e princípios**

São Paulo

2020

JOÃO MESSIAS JÚNIOR

**Análise da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares presente
em um livro didático de ensino superior: obtenção e análise de redes
conceituais e identificação de fatos, conceitos e princípios**

Versão Corrigida

Dissertação apresentada ao Instituto de Física, ao Instituto de Química, ao Instituto de Biociências e à Faculdade de Educação da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências.

Área de Concentração: Ensino de Ciências

Orientador: Prof. Dr. Flavio Antonio Maximiano

São Paulo

2020

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Messias Júnior, João

Análise da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares presente em um livro didático de ensino superior: obtenção e análise de redes conceituais e identificação de fatos, conceitos e princípios. São Paulo, 2020.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências.

Orientador: Prof. Dr. Flavio Antonio Maximiano

Área de Concentração: Ensino de Química

Unitermos: 1. Química – Estudo e Ensino; 2. Ensino e aprendizagem; 3. Interações intermoleculares; 4. Conteúdos conceituais; 5. Redes conceituais.

USP/IF/SBI-024/2020

A meus pais, meus primeiros professores, que me ensinaram o
valor dos estudos, com muito amor e gratidão.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Flavio Antonio Maximiano, querido professor e orientador que me acolheu como aluno, por toda a orientação durante o longo e árduo processo que foi a construção deste trabalho, e por promover momentos de discussão que, desde a Graduação, me fizeram refletir sobre meu papel enquanto aluno, professor e cientista.

À colega de grupo Maria Helena Zambelli, com quem pude compartilhar desesperos e desabafar sobre as dificuldades que ambos vivenciamos durante este processo.

À Editora Moderna, na pessoa de Rita Helena Bröckelmann, gerente e amiga, que me deu todo o apoio, incentivo e liberdade para a realização deste trabalho.

Aos meus amigos, especialmente Danilo, Lucas e Felipe, por tudo o que vivemos há mais de dez anos, alguns dos quais dividindo o mesmo lar, por me salvarem e por serem amigos tão leais e pessoas tão incríveis.

Ao Guilherme, meu amigo mais antigo e a quem sou grato por tantos momentos incríveis que vivemos juntos, por me ajudar nos momentos mais difíceis.

Aos meus pais, irmão e irmã, por todo amor incondicional, e por nos mantermos unidos, mesmo muito distantes.

Finalmente, porém não menos importante, à Mayra, minha companheira e meu amor, por estar sempre ao meu lado, me apoiando em meus projetos, a quem tenho enorme admiração e por quem a vida tem valido tanto a pena!

RESUMO

MESSIAS JÚNIOR, J. **Análise da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares presente em um livro didático de Ensino Superior:** obtenção e análise de redes conceituais e identificação de fatos, conceitos e princípios. 2020. 165 f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências) – Instituto de Física, Instituto de Química, Instituto de Biociências e Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2020.

O tema interações intermoleculares é pouco estudado na literatura, especialmente com relação à organização dos conceitos e como eles se relacionam na estrutura do conhecimento químico. No entanto, é um tema central na Química e que explica uma série de fenômenos, como a formação das diferentes fases da matéria e a definição de suas propriedades físicas. O principal objetivo deste trabalho, portanto, consistiu em levantar a estrutura conceitual desse tema presente em um livro didático de Ensino Superior, indicado como referência para as disciplinas de Química Geral dos cursos do Instituto de Química da Universidade de São Paulo, e analisá-la de acordo com métricas de análise de rede. Paralelamente a isso, procurou-se identificar os conteúdos conceituais no texto, verificando como os fatos, os conceitos e os princípios estão presentes e como eles se relacionam com a estrutura conceitual da rede. A metodologia baseou-se em dois momentos: o primeiro momento consistiu na leitura criteriosa do texto e na identificação dos conteúdos conceituais presentes, com base na definição do que são fatos, conceitos e princípios; o segundo momento consistiu na preparação do texto para obtenção de uma matriz de coocorrência, utilizando um software de análise de textos, e, posteriormente, na transformação dessa matriz em uma rede conceitual, por meio de outro software especializado que permite visualizar a estrutura obtida e calcular diversas métricas de análise de rede. Nessa etapa, analisou-se primeiramente um trecho pequeno do texto, como forma de explorar as métricas, verificando o que medem, que tipo de informações extraem da estrutura da rede e o que elas significam. Verificou-se quais delas são úteis nesse tipo de análise, identificando os nós mais importantes, os *clusters* da rede, e como eles estão ligados, definindo um núcleo de conceitos e analisando quais informações sobre o tema emergem das relações conceituais. Em seguida, no texto completo, procurou-se analisar como os conceitos se relacionam na nova estrutura, como a adição de novos conceitos impactam o núcleo da rede e se as relações conceituais ajudam a explicitar os princípios gerais do tema. Por fim, a análise de como os tipos de interação intermolecular se relacionam na estrutura da rede mostrou que as propriedades moleculares são fundamentais para compreender as características das interações intermoleculares e como elas influenciam na intensidade das interações, e evidenciou que todas elas, com exceção das ligações de hidrogênio, são de natureza eletrostática. Concluiu-se que as métricas de análise de rede foram úteis para analisar a estrutura conceitual do tema interações intermoleculares, fornecendo informações centrais que, ao serem explicitadas, podem auxiliar na compreensão do tema e facilitar o processo de aprendizagem de conceitos pelos alunos.

Palavras-chave: Interações intermoleculares. Redes conceituais. Conteúdos conceituais. Ensino e aprendizagem.

ABSTRACT

MESSIAS JÚNIOR, J. **Analysis of the conceptual structure on the topic of intermolecular forces present in a Higher Education textbook:** obtaining and analyzing conceptual networks and identifying facts, concepts, and principles. 2020. 165 f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências) – Instituto de Física, Instituto de Química, Instituto de Biociências e Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2020.

There is lack of studies on the topic of intermolecular forces in the literature, especially regarding the organization of concepts and how they relate to each other on the chemical knowledge structure. However, this is a central subject in Chemistry that explains lots of phenomena, such as the formation of different phases of matter and the influence of intermolecular forces to define physical properties. Therefore, this work aims to define the conceptual structure of this subject as it can be found in a Higher Education reference textbook for the disciplines of General Chemistry on the courses of the Instituto de Química at Universidade de São Paulo, and to analyze its structure according to some network analysis metrics. Besides that, we searched for conceptual contents in the text, verifying how facts, concepts, and principles are present, as well as how they relate to the conceptual structure of the network. The methodology was based on two stages: the first one consisted of reading the text carefully and identifying conceptual contents, based on the definition of facts, concepts, and principles; the second one consisted of text preparation to obtain a co-occurrence matrix, using a software for text analysis, and the later transformation of this matrix into a conceptual network, using another specific software that allows the visualization of the structure obtained and the calculation of several network metrics. At this stage, we firstly analyzed a small part of the text, in order to explore those metrics, checking exactly what they measure, what kind of information can be extracted from the network and what they mean. We determined what information is useful for this kind of analysis, identifying the most important nodes, the clusters in the network, and how they are connected, defining a core of concepts and analyzing what kind of information emerges from the conceptual relations. After that, we sought to analyze, in the complete text, how the concepts relate to each other in the new structure obtained, how the addition of new concepts impacts the core of concepts in the network and whether conceptual relations can help to explain the general principles of the topic. Finally, the analysis of how the types of intermolecular interactions are related in the structure of the network showed that molecular properties are fundamental to understand the characteristics of intermolecular interactions, how they influence the intensity of interactions, and it showed that all interactions but the hydrogen bonds have an electrostatic nature. We concluded that the metrics for network analysis were useful to analyze the conceptual structure on the topic of intermolecular interactions, providing important information that can help the understanding of this subject when explained, fostering the learning process of concepts to students.

Keywords: Intermolecular interactions. Conceptual networks. Conceptual contents. Teaching and Learning.

SUMÁRIO

APRESENTAÇÃO	9
CAPÍTULO 1: REFERENCIAL TEÓRICO	11
1.1 Conteúdos conceituais de aprendizagem	13
1.1.1 Definição de fatos, conceitos e princípios	14
1.2 A representação da estrutura de conhecimento e de aprendizado	16
1.2.1 Mapas conceituais	19
1.2.2 Rede conceituais	21
1.2.2.1 Métricas de análise de redes	27
1.2.2.1.1 Medidas de centralidade de grau	29
1.2.2.1.2 Medida de centralidade de proximidade	31
1.2.2.1.3 Medida de centralidade de intermediação	32
1.2.2.1.4 Agrupamentos de nós e detecção de comunidades	33
CAPÍTULO 2: INTERAÇÕES INTERMOLECULARES E SUA IMPORTÂNCIA NO ENSINO DE QUÍMICA	38
2.1 Análise do tema presente no objeto de análise	42
CAPÍTULO 3: OBJETIVOS	44
CAPÍTULO 4: DESCRIÇÃO E ANÁLISE PRELIMINAR DO TEXTO DIDÁTICO	47
4.1 Características gerais do objeto de análise	48
4.2 Descrição do capítulo sobre interações intermoleculares	50
4.2.1 Formação de fases condensadas	50
4.2.2 Forças íon-dipolo	52
4.2.3 Forças dipolo-dipolo	54
4.2.4 Forças de London	56
4.2.5 Ligação hidrogênio	58
4.3 Considerações sobre o tema no capítulo	61
CAPÍTULO 5: IDENTIFICAÇÃO DOS CONTEÚDOS CONCEITUAIS	63
5.1 Identificação dos princípios do texto	64
5.2 Definição dos conceitos do texto	69
5.2.1 Preparação do texto	70
5.2.2 Definição das categorias de conceitos	75
5.3 Identificação dos dados do texto	79
5.4 Considerações sobre os conteúdos conceituais no texto	86
CAPÍTULO 6: ANÁLISE DAS REDES CONCEITUAIS	88

6.1 Análise do texto como rede conceitual	90
6.1.1 Análise da correlação entre as medidas de centralidade	92
6.1.2 Análise da rede conceitual para o trecho correspondente à introdução	97
6.1.3 Medidas de centralidade de grau.....	103
6.1.4 Medida de centralidade de proximidade	108
6.1.5 Medida de centralidade de intermediação.....	110
6.1.6 Análise de aglomeração da rede sem “molécula”	113
6.1.7 Definição e análise do núcleo	118
6.1.8 Análise da rede conceitual sem o núcleo.....	121
CAPÍTULO 7: ANÁLISE DA REDE CONCEITUAL DO TEXTO COMPLETO	124
7.1 Definição e análise do núcleo	131
7.2 Relação entre os tipos de interação intermolecular	134
CAPÍTULO 8: CONCLUSÃO	142
REFERÊNCIAS	147
APÊNDICE A – TEXTO COMPLETO PREPARADO PARA RODAR NO IRAMUTEQ	155

APRESENTAÇÃO

Tomo a liberdade nesta introdução de me expressar em primeira pessoa e apresentar este trabalho que descreve todo o percurso desenvolvido para a obtenção da estrutura conceitual presente em um livro didático sobre o tema interações intermoleculares. A escolha deste tema como fio condutor desta pesquisa não foi por acaso. Após alguns anos trabalhando com produção e edição de materiais didáticos, me afastei da vida acadêmica. No entanto, depois de um tempo, senti a necessidade de retornar a esse ambiente, agora mais maduro e seguro de minhas escolhas e consciente de que trabalhar com ensino me encanta e é como me sinto, de fato, contribuindo de alguma forma, seja para a comunidade científica, seja para a comunidade escolar, e até mesmo – serei um tanto egoísta aqui – para minha satisfação em enxergar algo que concretizei após anos de esforço e sacrifícios.

Ao tomar essa decisão, portanto, encontrei no LAPAQ, o Laboratório de Pesquisa do Aprendizado em Química, do Instituto de Química – IQ-USP, na pessoa do Prof. Dr. Flavio Antonio Maximiano, uma oportunidade na qual eu pudesse me desenvolver nesse sentido.

Alinhando minha experiência com livros didáticos, a experiência do professor Flavio como pesquisador, professor e orientador, e a necessidade de compreender melhor as questões não tão bem resolvidas e pouco exploradas sobre as interações intermoleculares no contexto do ensino de Química, formou-se a tríade que deu origem a este trabalho.

As interações intermoleculares são um tema central para o conhecimento químico, mas que não é ensinado de uma forma que se tome ciência dessa centralidade e de sua importância. É nesse contexto que o aprendizado das redes se encaixa. As ferramentas que foram emprestadas do estudo das redes, que não são originalmente da área de ensino, tampouco da Química, mostraram ser de grande utilidade para evidenciar importantes relações entre conceitos químicos que não necessariamente estão tão explícitos e que, por vezes, se colocam como um empecilho ao processo de aprendizagem dos alunos e até mesmo dos químicos, por

não estar claro quais informações são as mais fundamentais e as que deveriam ser compreendidas para facilitar o acesso a outras que delas dependem.

E foi neste cenário de interações entre diferentes tópicos que realizamos este trabalho, intitulado *Análise da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares presente em um livro didático de ensino superior: obtenção e análise de redes conceituais e identificação de fatos, conceitos e princípios*, e organizado em oito capítulos que procuram escrever esta trajetória.

No capítulo 1 são apresentados os dois referenciais teóricos que embasaram a pesquisa: a ideia de conteúdos conceituais, proposta por Pozo e Crespo (2009), que orientou-nos na maneira de olhar para o conteúdo, e a Teoria das Redes Complexas, da qual tomamos emprestadas algumas ferramentas que nos permitiram trabalhar com o texto, extraindo dele informações que pudessem ser analisadas.

No capítulo 2 faz-se uma breve descrição do tema da pesquisa, as interações intermoleculares, apresentando o panorama de como se encontra a pesquisa na área de ensino, mais especificamente em livros didáticos, e justificando sua importância para o conhecimento químico, alinhando-se inclusive à ideia de Pozo e Crespo (2009) de que as interações são um princípio fundamental para a Química.

No capítulo 3 é apresentado o objetivo principal da pesquisa, que foi desdobrado em objetivos específicos, necessários para que este fosse alcançado.

No capítulo 4 faz-se uma descrição geral e uma discussão do material que serviu de objeto de análise para este trabalho, procurando identificar como as interações intermoleculares são apresentadas.

No capítulo 5 parte-se em uma busca pelos conteúdos conceituais no livro, procurando entender como eles se relacionam em um texto e de que forma é possível identificá-los.

Nos capítulos 6 e 7 são apresentadas as análises de rede, abordando toda a discussão sobre as estruturas conceituais, as métricas de rede, como são analisadas, quais informações se obtêm delas e o que significam.

Por último, no capítulo 8 é apresentada a conclusão deste trabalho, na qual procurou-se também levantar alguns questionamentos que surgiram no processo, como forma de reflexão sobre possibilidades futuras que podem derivar da pesquisa.

CAPÍTULO 1

Referencial teórico

Inúmeras pesquisas têm mostrado que a maioria dos alunos não aprende a ciência que lhes é ensinada. Aparentemente, eles aprendem cada vez menos e têm menos interesse pelo que aprendem (POZO; CRESPO, 2009). Com relação à Química, alguns dados ilustram essa questão (POZO; GÓMEZ CRESPO, 1997b):

- O modelo corpuscular da matéria é muito pouco utilizado para explicar suas propriedades e, quando se utiliza, são atribuídas às partículas as propriedades do mundo macroscópico (GÓMEZ CRESPO, 1996).
- Em muitas ocasiões não se diferencia mudança física de mudança química e podem aparecer interpretações do processo de dissolução em termos de reações, estas podendo ser interpretadas como se fossem uma dissolução ou uma mudança de estado (GÓMEZ CRESPO, 1996).

A dificuldade dos alunos em aprender conceitos científicos deve ser levada a sério caso se tenha a intenção de melhorar a educação científica. Muitas vezes, a forma como os alunos entendem os fenômenos científicos, embora não seja adequada, possui concepções muito persistentes e que praticamente não se modificam, ou são muito difíceis de serem modificadas. Por exemplo, em alguns estudos feitos sobre a concepção descontínua da matéria e de que ela é formada por partículas que interagem entre si, separadas por um espaço vazio, entre 10% e 30% das respostas dos alunos de diferentes séries assumem a ideia de vazio entre as partículas (POZO; GÓMEZ CRESPO; SANZ, 1993; STAVY, 1995). Entre alunos universitários dos últimos anos de Química, apenas 15% das respostas assumem a concepção descontínua da matéria (POZO; GÓMEZ CRESPO, 1997a). Essas dificuldades de compreensão podem inclusive ocorrer em professores de ciências e, com alguma frequência, em livros didáticos¹.

Com o foco na aprendizagem de conceitos e na construção de modelos (uma das metas da educação científica), atingir esse objetivo requer a superação das dificuldades de compreensão e envolve trabalhar os conteúdos conceituais dos mais simples (fatos ou dados) aos conteúdos disciplinares específicos, até alcançar os princípios estruturais das ciências.

¹ Cf. BACAS, P. Detección de las ideas del profesorado acerca de los conceptos de calor y temperatura. *Alambique*, v. 13, p. 109-116, 1997.

1.1 Conteúdos conceituais de aprendizagem

Na perspectiva da Psicologia Cognitiva, a essência do conhecimento se refere à organização das relações entre conceitos (ANDERSON, 1984; CLARIANA, 2010; SHAVELSON; RUIZ-PRIMO; WILEY, 2005). Dessa forma, uma vez que o conhecimento apresenta uma estrutura conceitual estabelecida, entende-se que no processo de aprendizagem novos conceitos se relacionam com conceitos já existentes, ocorrendo, portanto, uma reorganização das conexões existentes na mente do sujeito. Trata-se de um processo contínuo (NOVAK; GOWIN, 1984).

Os conceitos são inerentes ao processo de ensino e aprendizagem, e na Química são essenciais para a compreensão desta ciência, assim como para o entendimento e explicação de uma série de fenômenos que ocorrem diariamente. Os conceitos são, portanto, fundamentais nesse processo, e a partir da disponibilidade destes na estrutura mental dos alunos é que ocorre o aprendizado (MOREIRA, 2008).

No entanto, o número excessivo de conceitos presentes na prática escolar dificulta que o sujeito consiga relacioná-los e dar significado à sua aprendizagem. Pozo e Crespo (2009), portanto, indicam que no currículo da educação básica devem existir três tipos de conteúdo: procedimentais, atitudinais e conceituais. Os conteúdos procedimentais envolvem a apropriação de técnicas e procedimentos. Os conteúdos atitudinais, por sua vez, envolvem o desenvolvimento de atitudes, normas e valores. Já os conteúdos conceituais envolvem os saberes científicos estabelecidos e presentes nos programas disciplinares e manuais didáticos, e podem ser divididos em fatos, conceitos e princípios (COLL, 1986). O quadro a seguir resume os três tipos de conteúdo curricular propostos e mostra como eles se organizam, partindo dos mais específicos para aqueles mais gerais.

Quadro 1 – Tipos de conteúdo curricular

Tipos de conteúdos	Mais específicos	↔	Mais gerais
Conceituais	Fatos/dados	Conceitos	Princípios
Procedimentais	Técnicas		Estratégias
Atitudinais	Atitudes	Normas	Valores

Fonte: Pozo (2000).

Com foco na aprendizagem de conceitos, mais especificamente, de conceitos relacionados ao tema interações intermoleculares, o escopo deste trabalho ateve-se aos conteúdos conceituais, os quais são apresentados com mais detalhes a seguir.

1.1.1 Definição de fatos, conceitos e princípios

A forma de classificar os conteúdos da aprendizagem – em especial, os conteúdos conceituais – mostra-se útil quando se pensa em currículo. Para Coll et al. (2000, p. 302), “fato é algo que é ou que ocorre em um determinado momento e a partir do qual é possível descrever ou referir a realidade e as circunstâncias.” Pozo e Crespo (2009), baseados nessa definição, reforçam a ideia de que os fatos são informações que afirmam ou que declaram algo sobre o mundo. Reúnem-se e são expressados na forma de dados (uma data, uma cifra traduzindo o alcance que toma uma determinada dimensão, o resultado de uma operação matemática, um endereço ou um número de telefone etc.). O conhecimento factual serve como uma base de dados para poder entender a realidade, uma vez que atua como referente e ajuda a antecipar, a prever ou a decidir como se deve atuar sobre determinada situação. Ao conhecer as condições em que se produziu o fato, é possível repeti-lo, imitar sua produção, manipular ou variar o resultado obtido. No contexto da área de ensino, a aprendizagem de ciências requer conhecer muitos dados e fatos. No entanto, conhecer um fato permite, no melhor dos casos, reproduzi-lo ou predizê-lo (um objeto lançado para cima cai), mas não é suficiente para dar-lhe sentido, interpretá-lo ou explicá-lo. Segundo Coll et al. (2000), os fatos são necessários, mas devem ser interpretados em função dos próprios marcos conceituais. Para tal, utilizam-se os conceitos de modo a explicar por que ocorre o fato e quais as suas consequências. Ou seja, um conceito atribui significado aos fatos, explica por que ocorrem e que consequências eles têm (POZO; CRESPO, 2009).

Coll et al. (2000) afirmam que conceitos constituem representações das relações estabelecidas entre alguns objetos, fatos ou símbolos; ajudam a descrever, interpretar e explicar o mundo. Mais especificamente, ao pensar em conceitos científicos, estes não são elementos isolados, mas constituem uma rede, ou seja, estão relacionados a outros conceitos, de forma que sua profundidade, sua extensão e seu significado provêm, em grande parte, das relações significativas que estabelecem entre si (COLL et al., 2000).

Um exemplo que procura ilustrar isso afirma que para compreender o conceito de “velocidade” é necessário estabelecer uma relação entre conceitos previamente formados de “espaço” e “tempo” (COLL et al., 2000).

Fatos e conceitos, portanto, são conteúdos distintos, mas que configuram um conhecimento inter-relacionado. Ainda no contexto da área de ensino, os autores justificam essa relação entre fatos e conceitos ao afirmarem que

[...] os dados devem ser um meio, uma via para ter acesso a outras formas de conhecimento conceitual, mais próximas da compreensão. Os dados não se justificam em si mesmos se não promovem condutas ou conhecimentos significativos, mas em muitos casos são necessários para facilitar esse aprendizado mais significativo. (POZO; CRESPO, 2009, p. 81).

Ou seja, não é possível ensinar ciências sem o conhecimento de fatos. Mas é importante ressaltar que essa não deve ser (ou, pelo menos, não deveria ser) a finalidade do ensino de ciências, senão apenas uma forma de promover um aprendizado mais significativo, uma vez que a melhor forma de aprender um fato é compreendê-lo, e isso é possível por meio dos conceitos.

Embora fatos e conceitos estejam relacionados, são diferentes enquanto conteúdos da aprendizagem e, portanto, diferenciam-se no processo de aprendizagem e no tipo de estratégia de memória que é útil utilizar para lembrá-los (POZO; CRESPO, 2009). O quadro a seguir sintetiza essas diferenças quanto ao processo de aprendizagem de fatos e conceitos.

Quadro 2 – Diferenças entre fatos e conceitos enquanto conteúdos da aprendizagem

	Fato	Conceito
Consiste em	Cópia literal	Relação com conhecimentos anteriores
É aprendido	Por revisão (repetição)	Por compreensão (significado)
É adquirido	De uma vez	Gradualmente
É esquecido	Rapidamente sem revisão	Lenta e gradualmente

Fonte: Pozo e Crespo (2009, p. 83).

Enquanto fatos são apreendidos literalmente, de um modo reprodutivo e de uma vez, aprender conceitos envolve processos cognitivos mais profundos, tornando esse um processo de aprendizagem mais difícil. Diferentemente da aprendizagem de

fatos, entretanto, um conceito é retido por mais tempo e o processo de esquecimento é mais lento e gradual.

O último tipo de conteúdo conceitual apresentado compreende os princípios. Nas palavras de Pozo e Crespo (2009, p. 79), “os princípios seriam conceitos muito gerais, com um grande nível de abstração, que geralmente são subjacentes à organização conceitual de uma área, embora nem sempre sejam suficientemente explícitos.” Os princípios são entendidos também como enunciados que descrevem como alterações produzidas em um objeto, em um fato, em uma situação ou em determinado símbolo se relacionam com as mudanças produzidas em um outro objeto, fato, situação ou símbolo (COLL, 1986). Normalmente, são utilizados como sinônimos de regra ou de lei geral, isto é, compõem teorias explicativas e causais da realidade físico-natural e sociocultural (COLL et al., 2000).

Dessa forma, percebe-se que entre os fatos, conceitos e princípios há um gradiente crescente de generalização, de tal maneira que os conteúdos mais específicos – os fatos – deveriam ser o meio para acessar conteúdos mais gerais – os princípios –, que constituem propriamente as capacidades que precisam ser desenvolvidas (POZO, 1999a).

No contexto da Química, Pozo e Crespo (2009) defendem que os princípios podem ser agrupados em três núcleos conceituais: 1) a natureza corpuscular da matéria, 2) a conservação das propriedades da matéria, e 3) as relações quantitativas. Os autores defendem ainda a ideia de que a matéria pode ser entendida como um sistema de partículas que interagem, e que este é um princípio conceitual que deve ser ensinado desde a Educação Básica, ressaltando a importância das interações intermoleculares (JUNQUEIRA, 2017).

1.2 A representação da estrutura de conhecimento e de aprendizado

Como foi apresentado anteriormente, o conhecimento pode ser entendido como uma relação significativa entre conceitos. A estrutura do conhecimento se refere à organização das informações na mente humana, sendo estas as relações significativas, ou seja, as relações entre conceitos importantes usadas pelo sujeito para exprimir significados (CLARIANA, 2010; SHAVELSON; RUIZ- PRIMO; WILEY,

2005). Nesse sentido, o processo de aprendizagem consiste em reorganizar as relações entre esses conceitos.

Machado (2011) propõe a ideia de rede como metáfora para a representação do conhecimento. A estrutura de uma rede é formada pelas ligações existentes, e são elas que dão significado à essa estrutura. O conhecimento, portanto, seria a própria rede, em sua totalidade de relações e complexidades, e não regiões isoladas dela. Importante dizer também que essa rede está em permanente transformação. Canato Júnior (2014, p. 91) afirma que “sendo rede, o conhecimento se assemelha muito mais a multiplicidade de caminhos dos hipertextos e rizomas² do que com a linearidade dos textos ou o crescimento verticalizado e enraizado das árvores.” Essa afirmação ajuda a analisar criticamente o significado pedagógico da ideia de rede. Permite considerar, as múltiplas possibilidades de articulação entre os nós (elementos da rede) e as relações entre eles, além dos diversos caminhos que se pode percorrer na rede de significados, independentemente do tema (MACHADO, 2011).

A metáfora do hipertexto proposta por Levy (1993), como constituindo uma imensa rede dos universos mentais ou de significações, elenca seis características inerentes aos hipertextos: o princípio da metamorfose, indicando que a rede hipertextual está em constante construção e renegociação; o princípio da heterogeneidade, indicando que tanto os nós quanto as conexões de uma rede hipertextual são heterogêneos, ou seja, são de naturezas diferentes; o princípio de multiplicidade e encaixe das escalas, indicando que qualquer nó ou conexão em um hipertexto pode revelar-se como sendo composto por toda uma rede; o princípio da exterioridade, indicando que uma rede hipertextual só tem sua composição modificada por fatores externos, ou seja, pela adição de novos nós ou conexões, por exemplo; o princípio da topologia, indicando que tudo o que acontece em uma rede hipertextual, qualquer fluxo de informações etc., segue os caminhos existentes, não sendo possível utilizar outros a menos que a estrutura seja modificada; e, por fim, o princípio de mobilidade dos centros, indicando que esse acentrismo das redes hipertextuais está relacionado com a dinâmica da estrutura. Esses princípios se alinham à ideia de

² “[...] espécie de caule superficial ou subterrâneo que cresce paralelamente ao solo e de cujas gemas, distribuídas ao longo de sua extensão, surgem os brotos de plantas como a grama e a cana de açúcar, que se desenvolvem como tufos alimentados pelo trânsito de nutrientes possibilitado pelas interconexões do rizoma. Cortado, o rizoma continua a se reproduzir originando novas gemas e brotos que se espalham pelo solo e conferem resistência ao vegetal. Diferentemente de uma árvore, não há uma raiz a ser cortada a fim de dar cabo ao rizoma.” (CANATO JÚNIOR, 2014, p. 97).

conhecimento como rede e a ampliam, e os significados dessa metáfora podem se relacionar, por exemplo, ao contexto dos processos de ensino e aprendizagem. Nas palavras de Canato Júnior (2014, p. 97),

Aprender um novo significado é incorporá-lo a uma rede de significados pré-existent, que modificada topologicamente por tal incremento, permite ressignificar conceitos anteriormente desconexos ou previamente conectados de forma equivocada. Como em toda a rede, o estabelecimento de uma única nova conexão ou a ruptura de outra pré-existente, bem como a inclusão ou exclusão de um determinado nó, pode provocar alterações significativas no fluxo de informações permitido pela rede de significados própria de cada aluno.

Levando em consideração essa metáfora da rede, Machado (2011) apresenta os pontos que compreendem o processo de aprendizagem:

- compreender é apreender o significado;
- apreender o significado de um objeto ou de um acontecimento é vê-lo em suas relações com outros objetos ou acontecimentos;
- os significados constituem, pois, feixes de relações;
- as relações entretecem-se, articulam-se em teias, em redes, construídas social e individualmente, e em permanente estado de atualização;
- em ambos os níveis – individual e social – a ideia de conhecer assemelha-se à de enredar.

É importante notar que esses pontos alinham-se com as afirmações de que o conhecimento se estrutura nas relações entre os conceitos, que a aprendizagem implica a reorganização desses conceitos (NOVAK; GOWIN, 1984), e que o significado de um conceito considera a relação que ele estabelece com os demais que constituem a estrutura do conhecimento (POZO; CRESPO, 2009).

Há diferentes formas de se representar a estrutura do conhecimento e uma delas é por meio de representações gráficas, nas quais é possível visualizar como se comunicam os elementos que constituem essa estrutura. Segundo Okada (2006), os mapas cognitivos – aqui restringindo-se aos mapas conceituais e às redes conceituais – são uma maneira de representar graficamente como o conhecimento se organiza na mente humana pela proximidade semântica de conceitos e ideias.

1.2.1 Mapas conceituais

Os mapas conceituais foram criados com o objetivo de representar as mudanças conceituais de alunos ocorridas ao longo de um estudo longitudinal de doze anos, baseando-se na Teoria da Aprendizagem Significativa de David Ausubel (NOVAK; CAÑAS, 2007). Em linhas gerais, segundo essa teoria, a aprendizagem significativa requer três condições básicas para ocorrer: 1) o material ou objeto a ser aprendido deve ser conceitualmente claro e apresentar linguagem e exemplo que se relacionam com o conhecimento prévio do sujeito; 2) o sujeito deve apresentar conhecimentos prévios relevantes sobre o objeto; e 3) o sujeito deve escolher aprender de modo significativo, ou seja, deve ser motivado a aprender. Em linhas gerais, os mapas conceituais apresentam as relações entre conceitos por meio de proposições, que são as unidades fundamentais que constituem essa representação e que carregam consigo uma relação de significado. Na tentativa de sintetizar essas ideias, a Figura 1, a seguir, traz um exemplo de mapa conceitual cujas relações procuram representar a própria definição de mapa conceitual.

Figura 1 – Mapa conceitual cujas proposições estruturam a própria definição de mapa conceitual (CmapTools 6.01.01)

Fonte: autoria própria (2020).

Estruturalmente, os mapas conceituais são formados por nós dispostos em caixas, que representam os conceitos, e por arestas, que representam as relações

entre os conceitos, ou seja, as frases de ligação (JUNQUEIRA, 2013). As setas indicam o sentido de leitura das proposições.

Mapas conceituais apresentam diversas aplicações; por exemplo, na área de ensino e aprendizagem, podem ser aplicados como ferramenta de organização do conhecimento, para auxiliar os alunos no aprofundamento das suas aprendizagens e os docentes na avaliação e reconstrução das práticas pedagógicas (OKADA, 2006). Podem ainda servir como forma de avaliação, permitindo que os docentes captem os significados explicitados pelos alunos sobre determinado assunto, fornecendo um diagnóstico mais completo dos erros conceituais (TOIGO; MOREIRA, 2008; ARAÚJO; MENEZES; CURY, 2002; LOMASK et al., 1992; RUIZ-PRIMO; SHAVELSON, 1996).

A Figura 2 a seguir apresenta um mapa conceitual que sintetiza as relações existentes entre os conteúdos conceituais definidos por Pozo e Crespo (2009).

Figura 2 – Mapa conceitual mostrando as relações entre os conteúdos conceituais

Fonte: autoria própria (2020).

No mapa conceitual, o fenômeno de interação estaria relacionado aos princípios, definido como um princípio conceitual importante e que subjaz toda a

Química, atravessando todos os conteúdos e estabelecendo as relações entre diferentes conceitos químicos.

Percebe-se também que os três conteúdos conceituais, além de estarem relacionados entre si, estão também relacionados à rede de significados, ou seja, à estrutura conceitual que mostra como cada conceito presente em determinado tema se relaciona com os demais. Nesse sentido, cada conteúdo apresenta uma função na rede; os princípios a estruturam por meio das relações entre os conceitos, que dão sentido aos dados.

Pensando na aprendizagem de princípios como um dos objetivos da educação científica, torná-los claros e explícitos pode auxiliar os alunos no processo de elaboração mental das relações conceituais. Nesse sentido, acredita-se que o levantamento da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares é importante para ressaltar quais são os conceitos e as relações mais importantes.

1.2.2 Rede conceituais

As redes conceituais – também chamadas de redes de conceitos – foram desenvolvidas primeiramente para os estudos ligados à inteligência artificial, mas algumas versões têm sido aplicadas em outras áreas como na educação (CASAS-GARCÍA; LUENGO-GONZÁLEZ, 2012; CLARIANA; WALLACE; GODSHALK, 2009; DUNLAP; GRABINGER, 1994; SCHVANEVELDT; DURSO; DEARHOLT, 1989). Essas estruturas gráficas são construídas baseadas na Teoria dos grafos³, portanto revelam entidades, como os nós nas redes, e relações entre entidades, como conexões entre nós. A ligação entre dois conceitos ressalta a existência de uma relação significativa entre eles, como mostra a Figura 3, a seguir.

³ Um grafo é um objeto matemático (ou uma estrutura matemática) formado por dois conjuntos. O primeiro deles, denominado V , é o conjunto de vértices. O segundo, denominado E , é o conjunto de arestas e representa as relações entre os vértices (BOAVENTURA NETTO, JURKIEWICZ, 2017).

Figura 3 – Exemplo de uma rede de conceitos produzida pelo Pathfinder^{®4}, com o algoritmo também chamado Pathfinder, a partir de um texto escrito por um estudante sobre “Como se faz ciência”

Fonte: Junqueira (2013).

Percebe-se que se trata de uma representação bidimensional em que cada palavra representa um conceito, que é simbolizado como um nó na rede, e as ligações entre os nós refletem alguma característica dos dados que a originaram e evidenciam as possíveis relações entre os conceitos (SCHVANEVELDT; DURSO; DEARHOLT, 1989). Aqui vale ressaltar algumas diferenças entre redes conceituais e mapas conceituais: enquanto as redes evidenciam a existência ou não de relações significativas entre os nós, permitindo a visualização de um texto na forma de uma representação gráfica, nos mapas conceituais, embora possam ser interpretados como grafos, as relações existentes entre os conceitos trazem um significado explícito traduzido na forma de uma proposição, e estão mais vinculados à organização do pensamento (CANATO JÚNIOR, 2014).

Uma maneira de se construir redes conceituais é por meio de sua representação na forma de uma matriz, denominada matriz de adjacência. Segundo Estrada (2011), dois nós u e v são adjacentes se estão unidos por uma aresta $e = (u, v)$. Nesse sentido, a adjacência indica a existência de uma relação entre dois nós, e a forma de verificar a quantidade de conexões entre eles, ou entre um nó u e os

⁴ Recurso computacional com algoritmos próprios para construção de redes de conceitos (SCHVANEVELDT; DEARHOLT; DURSO, 1989).

demais, se dá por meio da análise de similitude, que consiste em verificar as relações valoradas entre os termos (CORRALLO, 2017). A técnica utilizada neste trabalho para medir a similitude entre os termos é a da coocorrência de conceitos medida nas frases.

Pela análise de similitude, obtém-se uma matriz, chamada de matriz de coocorrências. Um exemplo dessa matriz é mostrado na Figura 4, a seguir.

Figura 4 – Matriz de coocorrência entre os termos presentes em um parágrafo do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012)

	Matéria	Estado físico	Substância	Líquido	Arranjo	Fase	Sólido	Molécula	Gás	Forças intermoleculares	Vapor	Átomo
Matéria												
Estado físico	2											
Substância	0	0										
Líquido	1	1	1									
Arranjo	0	0	1	0								
Fase	3	2	2	3	1							
Sólido	1	1	2	3	1	5						
Molécula	0	0	1	0	1	1	1					
Gás	1	1	1	2	0	2	2	0				
Forças intermoleculares	1	0	0	0	0	1	0	0	0			
Vapor	1	1	1	2	0	2	2	0	2	0		
átomo	0	0	1	0	1	1	1	1	0	0	0	

Fonte: autoria própria (2020).

Sempre que dois conceitos ocorrem na mesma frase, na matriz de coocorrência é atribuído ao par o valor 1. Por sua vez, quando não há coocorrência, atribui-se o valor 0. Na análise de similitude, no entanto, são atribuídos pesos às coocorrências, indicando também quantas vezes um par de conceitos apareceu na mesma frase. Percebe-se, por exemplo, que os conceitos “sólido” e “fase” aparecem cinco vezes; logo, a coocorrência entre eles é 5, como mostra o destaque em amarelo. A rede obtida dessa matriz é mostrada na Figura 5.

Figura 5 – Rede obtida da matriz de coocorrência A espessura das arestas é proporcional ao peso das coocorrências e os números indicam quantitativamente esses pesos (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Nesta rede, obtida a partir da matriz de coocorrência para um trecho do texto do capítulo “Líquidos e sólidos” (ATKINS; JONES, 2012), cada nó corresponde a um conceito e as arestas que unem os nós correspondem às coocorrências entre os conceitos. Os números em vermelho sobre as arestas indicam os pesos das ligações entre conceitos e, portanto, quanto maior o peso, maior o número de coocorrências para o trecho analisado. Nesse sentido, as ligações de maior peso ocorrem entre os pares de conceitos “sólido” e “fase”, “sólido” e “líquido”, “líquido” e “fase”, “fase” e “matéria”. Essas relações conceituais descrevem as fases condensadas da matéria e os outros conceitos da rede se relacionam com estes de maior peso, apresentando relações cujas informações auxiliam na compreensão da formação e fases condensadas.

Uma característica geral desta rede diz respeito às relações conceituais. Tomando um par de conceitos qualquer, por exemplo, “substância” e “fase”, a ligação entre eles apenas indica que há coocorrência entre os conceitos e o peso dessa ligação. Não há um sentido de leitura para compreender a relação conceitual entre eles, ou seja, não existe uma relação de dependência entre os conceitos, algo como “substância” → “fase” ou “fase” → “substância”. Redes desse tipo são denominadas não direcionais. Por sua vez, se houvesse essa dependência entre os conceitos, a rede seria denominada direcional. Um exemplo de rede direcional obtida a partir de

um texto é apresentado na Figura 6 a seguir, obtido de Antikeira et al. (2005) para o poema “No meio do caminho” de Carlos Drummond de Andrade.

Figura 6 – Poema "No meio do caminho" de Carlos Drummond de Andrade e rede direcional obtida a partir dele, mostrando as ligações entre as palavras adjacentes. Os números sobre as setas indicam o peso das ligações entre essas palavras.

Fonte: Antikeira et al. (2005).

Neste exemplo, a ordem de leitura das ligações é importante para a compreensão do texto e deve seguir a orientação das setas que ligam as palavras.

O esquema a seguir resume as principais etapas para a obtenção de uma rede conceitual a partir de um texto (Figura 7).

Figura 7 – Esquema geral do processo de transformação de texto em rede conceitual

Fonte: Maximiano e Silva (2013).

Não são apenas textos que podem ser representados graficamente por redes. As redes conceituais compreendem um tipo específico, nas quais as relações se estabelecem entre conceitos. No entanto, a ideia de redes é muito mais ampla e envolve a representação de processos ou da interação entre entidades. Uma definição geral de redes é apresentada por Estrada (2011, p. 4):

Uma rede (grafo) é uma representação diagramática de um sistema. Consiste em nós (vértices), que representam as entidades do sistema. Pares de nós são unidos por *links* (arestas), que representam um tipo particular de interconexão entre essas entidades.

Nesse sentido, expandindo a noção de redes para além das redes conceituais, Canato Júnior (2014) exemplifica essa ideia ao citar diferentes aplicações para as redes e ao mostrar que, mesmo de naturezas distintas, há aspectos semelhantes que podem ser identificados e que fornecem informações importantes sobre as redes. Sobre isso, o autor afirma que

[...] importantes semelhanças topológicas têm sido reveladas em redes de natureza tão diferentes como as conexões neuronais, as amizades entre usuários do *Facebook*, as interligações entre dispositivos de um circuito elétrico, os hipertextos da *web* e os mapeamentos de atuações conjuntas em filmes de cinema ou de coautorias de artigos científicos.

[...]

Como em qualquer campo específico de conhecimento, há toda uma linguagem própria associada aos estudos dessas redes, sendo exemplo disso termos como *redes de pequeno mundo*, *redes livres de escala*, *centralidades de grau*, *de intermediação* e *de proximidade*, *hubs*, *clusters*, *mineração* e *lematização de textos*. (CANATO JÚNIOR, 2014, p. 49, grifo do autor)

Esse conjunto de termos permite analisar, por exemplo, características dos nós da rede, como a distribuição do número de ligações que cada um estabelece, mas não somente isso. A importância relativa de cada nó é uma informação importante que pode ser determinada por meio das medidas de centralidade, e que fornece informações como a capacidade de contribuir para a eficácia da rede. Esses nós mais importantes absorvem e processam mais informações relevantes e podem ser considerados como centros da rede. Tais centros, porém, não são fixos e não são únicos: tratam-se de estruturas dinâmicas que estão em constante transformação, se reestruturando a cada adição ou eliminação de nós (CANATO JÚNIOR, 2014).

Esse arcabouço teórico aqui brevemente apresentado compreende o campo de estudos denominado Teoria das Redes Complexas. Por fazer parte desse conjunto, as redes conceituais também podem ser analisadas com base nos fundamentos dessa teoria e, neste trabalho, foram utilizadas algumas dessas medidas para analisar a estrutura conceitual obtida a partir do texto escolhido.

1.2.2.1 Métricas de análise de redes

Na análise de redes, a unidade básica de análise é chamada nó e a conexão entre os nós é chamada aresta (YUN; PARK, 2018). Essa conexão indica que existe uma relação significativa entre dois nós no segmento de texto pré-estabelecido (frase, parágrafo etc.), no caso, uma relação de coocorrência entre eles. Nesse tipo de análise, as principais técnicas utilizadas são, segundo Smith et al. (2009): visão geral da rede, análise de centralidade, de *cluster* e rede-ego.

A visão geral da rede fornece um panorama que descreve seus principais elementos, como o número de nós e de arestas, a densidade (que mede o quão próxima a rede está de ser completa, ou seja, de ter todas as arestas possíveis, e densidade igual a 1), o diâmetro (a maior distância entre dois nós da rede) e a menor distância média da rede, ou seja, a média dos caminhos geodésicos, que são os de menor comprimento entre dois nós. A análise de centralidade é calculada separadamente para cada nó e compreende as medidas de centralidade de grau (a capacidade de um nó se comunicar diretamente com outros nós), centralidade de proximidade (a proximidade desse nó para com os demais nós da rede), e centralidade de intermediação, que mede a quantidade de pares de nós que necessitam de um nó específico que atua como intermediário na comunicação entre eles (BORGATTI; EVERETT; JOHNSON, 2013). Nesse tipo de análise, o objetivo é a identificação dos nós (conceitos) mais importantes (ESTRADA, 2011), que estão relacionados com as medidas de centralidade (BORGATTI, 2005; BORGATTI; EVERETT, 2006; FRIEDKIN, 1991), e cujas primeiras tentativas de quantificá-las foram feitas usando esse conceito de medidas de centralidade em redes de comunicação (BAVELAS, 1948; BAVELAS, 1950; LEAVITT, 1951). Por fim, outra etapa importante é a análise de *clusters*, que são regiões caracterizadas por uma grande aglomeração de nós, e a análise da rede-ego. A rede-ego é uma sub-rede formada por um nó central, chamado ego, e todos os nós conectados a ele, considerando as ligações entre os nós ligados

ao nó central (LIMA; MARQUES-NETO, 2018; ARNABOLDI et al., 2016). A análise da rede-ego consiste em selecionar um nó específico e extrair a sub-rede relacionada a ele (WASSERMAN; FAUST, 1994). Para ilustrar, a Figura 8 a seguir traz um recorte da rede da Figura 5 (p. 29) evidenciando a estrutura da rede-ego para o conceito “estado físico”.⁵

Figura 8 – Rede-ego de "estado físico" A espessura das arestas é proporcional ao peso das coocorrências e os números indicam quantitativamente esses pesos (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Nessa nova estrutura, percebe-se que alguns conceitos não estão mais presentes. São eles: “substância”, “molécula”, “arranjo”, “átomo” e “forças intermoleculares”. Isso mostra que eles não fazem parte da rede-ego de “estado físico”, pois não se ligam diretamente a ele. Os conceitos presentes têm pelo menos uma ligação direta com “estado físico” e com todos os demais que fazem parte da estrutura mostrada. Isso mostra a ideia de estado físico que é apresentada no texto, pois o significado dele está associado às relações existentes com os demais conceitos que constituem sua rede-ego.

⁵ A escolha desse conceito foi aleatória e serviu apenas para ilustrar um exemplo de rede-ego obtida a partir de uma rede.

As medidas de centralidade garantem a existência de fluxo de informações entre os nós. Essa comunicação é um processo global e ocorre independentemente da natureza da rede. Ocorre, por exemplo, na troca de opiniões ou informações em redes sociais, ou na transferência de informações de uma molécula ou célula para outra molécula ou célula, por algum sinal químico ou elétrico. Essa propriedade define o conceito de comunicabilidade da rede, que leva em consideração todos os caminhos possíveis entre dois nós; dentre eles, o caminho mais curto é o de maior contribuição para o fluxo de informações, pois é o mais eficiente e econômico em transportar a informação de um nó para outro (ESTRADA, 2011). Segundo Corrallo (2017), as medidas de centralidade são ferramentas de mensuração dos nós de uma rede, e que permitem determinar a importância deles de acordo com sua posição estrutural, além de estampar as relações existentes entre os demais nós da rede em análise. Borba (2013), por sua vez, afirma que um aspecto importante em análises de redes é decidir quais são os nós ou as arestas mais importantes, ou seja, os mais centrais. Ou seja, a noção de centralidade, em várias aplicações, é associada à importância do elemento na estrutura (BORBA, 2013). Nesse sentido, as medidas de centralidade são uma forma de quantificar essa importância. Alves e Santos (2010, p. 78) destacam que a “medida de centralidade também pode fornecer *insights* inesperados sobre o funcionamento da rede. Essa medida se refere ao grau com que as atividades da rede são centradas em um ou mais atores – o núcleo da rede.”.

Vários autores aplicam as medidas de centralidade no estudo de redes em diferentes contextos (BOTELHO; SOUSA, 2011; BORBA, 2013; ESTRADA, 2011; NEWMAN, 2010). A seguir, são apresentadas as definições das principais medidas de centralidade utilizadas neste trabalho.

1.2.2.1.1 Medidas de centralidade de grau

O grau é definido como o número de ligações que um nó estabelece com outros nós, e seu uso como medida de centralidade em uma rede foi estabelecido por Freeman⁶ (1979), que afirma que um nó com maior grau que outro é mais central e tem mais influência sobre outros nós. Ou seja, considerando o fluxo de informações em uma rede, a chance dessa informação chegar em outros pontos da rede passando

⁶ Originalmente chamada por Freeman de *Point Centrality* (BORBA, 2013).

por determinado nó é proporcional ao seu grau. Pode-se afirmar, portanto, que nós com grau alto permitem o fluxo de informação mais eficientemente, de modo que ela atinja mais nós na rede (ESTRADA, 2011).

Associada à centralidade de grau (c_D), pode-se determinar não apenas o número de conexões que determinado nó apresenta, mas a soma de todas as coocorrências que estabelece com outros nós. Para levar em consideração esse “peso” das conexões entre nós, determina-se a centralidade de grau total (c_{TD}).

Esse estudo de centralidade foi aprofundado com a introdução do conceito de centralidade de autovetor (centralidade eigenvector), estabelecido por Bonacich (1987). Segundo esse conceito, a centralidade dos nós é função, ou seja, está relacionada com a centralidade dos outros nós aos quais eles estão conectados. Dessa forma, os elementos mais importantes são os que apresentam alta conectividade com elementos que também têm alta conectividade. Essa medida permite mensurar os elementos centrais de uma rede ao medir a interação destes com seus vizinhos mais próximos (CORRALLO, 2017). A Figura 9, a seguir, apresenta três representações para uma rede genérica, cada uma destacando uma das medidas de centralidade de grau.

Figura 9 – Representação de uma rede com destaque para (a) centralidade de grau, (b) centralidade de grau total e (c) centralidade de autovetor. Os diâmetros dos nós e a intensidade das cores são proporcionais às medidas de centralidade (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020)⁷.

⁷ Os números que correspondem aos pesos das arestas foram omitidos para facilitar a visualização das estruturas e dos nós.

Em (a), percebe-se que os nós G, C, E, D têm os maiores graus na rede, cada um fazendo seis ligações com outros nós. Por essa medida, esses são os mais centrais, enquanto os nós B e H são os mais periféricos, com quatro ligações cada um, apresentando os menores graus na rede. Os nós A e F apresentam valores intermediários de grau. Em (b), o nó D apresenta o maior grau total, seguido de F. Além do diâmetro e da intensidade das cores, isso fica evidente também pela espessura das arestas que unem esses nós. Os demais nós, C, E e G, seguidos de A e H, apresentam valores intermediários, enquanto o nó B apresenta o menor valor para essa medida. Por fim, em (c), os nós G e E apresentam as maiores medidas de autovetor, seguidos de D e C. Os demais, F, A, H e B, apresentam valores gradativamente menores para essa medida.

Por meio dessa análise, pode-se concluir que o nó D é o mais central nessa rede, pois apresenta valores altos para as medidas de centralidade, destacando-se em todas. Por sua vez, o nó B é o mais periférico, apresentando os valores mais baixos para todas as medidas.

1.2.2.1.2 Medida de centralidade de proximidade

Em análise de redes a importância de um nó não está associada apenas ao número de conexões que estabelece com os demais, mas também pode levar em consideração o quão próximo ele está de todos os outros nós da rede. Essa medida, denominada centralidade de proximidade (c_c), é definida como o inverso do somatório de todas as menores distâncias de um nó para os demais nós da rede (WASSERMAN; FAUST, 1994; FREEMAN, 1979). Ou seja, essa medida está associada à distância total de um nó a todos os demais nós (CANATO JÚNIOR, 2014). A Figura 10, a seguir, representa a mesma rede da Figura 5 com destaque para a centralidade de proximidade.

Figura 10 – Representação de uma rede com destaque para a centralidade de proximidade. Os diâmetros dos nós e a intensidade das cores são proporcionais à medida de centralidade (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Segundo essa medida, os nós C, D, E e G apresentam os maiores valores e, portanto, estão mais próximos de todos os nós dessa rede. Isso se verifica na estrutura da rede uma vez que, partindo de qualquer um deles, a maior distância percorrida para se chegar a um nó qualquer é igual 2. Os nós A e F apresentam valores intermediários, enquanto os nós B e H apresentam os menores valores. Neste exemplo, a maior distância percorrida por eles para se chegar a um nó também é 2, no entanto, essa distância é percorrida mais vezes; logo, são os nós que se encontram mais afastados dos demais.

1.2.2.1.3 Medida de centralidade de intermediação

Outra medida de centralidade importante está relacionada ao fluxo de informação entre os nós da rede. Essa medida, chamada centralidade de intermediação (c_B), leva em consideração as informações que passam por determinado nó, que é responsável por estabelecer a comunicação entre pares de nós na rede (FREEMAN, 1979). Em outras palavras, a centralidade de intermediação está associada ao número de vezes que um nó se apresenta ao longo do caminho mais curto (caminho geodésico) entre um par de nós (CANATO JÚNIOR, 2014; CORRALLO, 2017).

A Figura 11 a seguir representa a mesma rede das Figuras 5 e 6, agora com destaque para a centralidade de intermediação.

Figura 11 – Representação de uma rede com destaque para a centralidade de intermediação. Os diâmetros dos nós e a intensidade das cores são proporcionais à medida de centralidade (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

O nó C apresenta a maior centralidade de intermediação na rede. Isso significa que ele se encontra na maioria dos caminhos geodésicos entre os demais nós, sendo importante para estabelecer a comunicação entre eles. Em seguida, os nós E e G, D, A, B e H têm valores intermediários para essa medida. No outro extremo, o nó F apresenta a menor intermediação na rede, sendo responsável por estabelecer uma ligação apenas entre os nós A e C. Conclui-se, portanto, que o nó C é o mais importante nessa rede, segundo essa medida. Pela análise de todas as medidas de centralidade apresentadas – grau, grau total, autovetor, proximidade e intermediação –, os nós C, D, E e G são os mais importantes, ocupando posições centrais nessa estrutura e responsáveis pela maioria das relações conceituais na rede.

1.2.2.1.4 Agrupamentos de nós e detecção de comunidades

De maneira simples, comunidades em uma rede, também chamadas de *clusters*, podem ser definidas como grupos de nós cuja densidade de arestas é maior

dentro de cada grupo do que entre os grupos (BORBA, 2013). Um exemplo de comunidades em uma rede é apresentado na Figura 12 a seguir.

Figura 12 – Estrutura de uma rede genérica com destaque para as três comunidades. Em cada uma, a densidade das arestas é maior dentro da comunidade (arestas mais escuras) do que fora (arestas mais claras)

Fonte: Girvan e Newman (2002).

Existem diversos algoritmos de detecção de comunidades em redes. O método tradicional é denominado aglomeração hierárquica (GIRVAN; NEWMAN, 2002), o qual se baseia em conceitos de similaridade entre os nós e são classificados em aglomerativos e divisivos (JAIN; DUBES, 1988). A descrição feita por Botelho e Sousa (2011) ajuda a entender esses dois métodos. No método aglomerativo, cada nó da rede é considerado uma comunidade e, iterativamente, são adicionadas arestas ligando os nós até se obter uma rede única. Por sua vez, no método divisivo tem-se o caminho inverso: partindo da rede completa vão sendo eliminadas as arestas sucessivamente, obtendo-se sub-redes cada vez menores até que cada nó isolado seja uma rede, ou até que um critério de parada seja estabelecido (BOTELHO; SOUSA, 2011).

Em ambos os métodos se constrói uma matriz de pesos, $\mathbf{W}$, na qual esses pesos representam de alguma forma a interação entre os nós. Após a obtenção da matriz, no método aglomerativo parte-se da rede vazia e são adicionadas arestas

entre os nós em ordem decrescente de pesos, gerando um diagrama conhecido como dendrograma. No método divisivo, a determinação das comunidades se faz por meio de cortes nesse diagrama: um corte abaixo de determinada aresta fornece a estrutura da comunidade antes da adição dessa aresta (BORBA, 2013) (Figura 13).

Figura 13 – Exemplo de dendrograma. Os círculos representam os nós da rede e os links representam a ordem na qual esses nós foram ligados, de acordo com os pesos da matriz W .

Fonte: Girvan e Newman (2002).

Neste exemplo, a rede é formada por 12 nós (A a L), ligados como mostra o dendrograma. Um corte na aresta mais alta divide a rede em duas comunidades: uma formada pelos nós A, B, C, D, E, F e G, e outra formada pelos nós H, I, J, K e L. Dessa forma, um corte nas arestas superiores das duas comunidades formadas, separa a rede em três novas comunidades, uma formada pelos nós A, B, C, D, E e F, outra formada pelos nós H e I, e mais uma formada pelos nós J, K e L. O nó G fica isolado dos demais.

Além do método de aglomeração hierárquica, Girvan e Newman (2002) propuseram um método de determinação de comunidades que adapta a centralidade de intermediação de nós para as arestas da rede. Enquanto no primeiro método são inseridas arestas entre nós seguindo uma ordem decrescente de peso, o método Girvan-Newman (GN) utiliza um algoritmo divisivo de remoção das arestas menos centrais, ou seja, aquelas localizadas entre as comunidades. Eles definiram a

intermediação de aresta (c_{BL}) como o número de caminhos geodésicos entre dois nós que passam por determinada aresta (GIRVAN; NEWMAN, 2002). Essas arestas são responsáveis por ligar comunidades em uma rede e, ao removê-las, as comunidades subjacentes são reveladas como estruturas separadas.

As etapas do algoritmo GN para determinar as comunidades da rede são descritas a seguir:

1. Calcular o valor de c_{BL} para todas as arestas da rede.
2. Remover a aresta com o maior valor de c_{BL} .
3. Recalcular c_{BL} para todas as arestas afetadas pela remoção.
4. Repetir o método a partir da etapa 2 até não restar mais arestas.

O algoritmo GN é eficiente na detecção de comunidades, porém é custoso computacionalmente, demandando tempos relativamente longos para as iterações e determinação das comunidades (NEWMAN, 2004; CLAUSET; NEWMAN; MOORE, 2004; BOTELHO; SOUSA, 2011). Para uma rede contendo n nós e m arestas, por exemplo, o tempo gasto para a determinar as comunidades no pior dos casos é uma função do tipo $O(m^2n)$ ou do tipo $O(n^3)$ para redes esparsas. Além disso, outro problema para detectar comunidades em uma rede está relacionado em como definir a melhor divisão da rede. Para resolver essa questão, outros métodos foram propostos e um deles está baseado em uma propriedade chamada modularidade (NEWMAN; 2004). Por meio dele, no pior dos casos, o tempo gasto para determinar comunidades em uma rede contendo n nós e m arestas, por exemplo, é uma função do tipo $O(n^2)$ para redes esparsas.

A modularidade, Q , é uma propriedade que mede a “qualidade” de particionamento da rede para formação de comunidades. Pode ser calculada segundo a expressão:

$$Q = \sum_i (e_{ii} - a_i^2) \quad (5)$$

em que:

e_{ii} = fração das arestas que pertencem à comunidade i ;

a_i^2 = fração das arestas que pertencem à comunidade i , considerando que são inseridas aleatoriamente.

O cálculo da modularidade pode fornecer valores tanto positivos quanto negativos, sendo que valores positivos indicam a possível presença de comunidades. O resultado do cálculo de Q diz que, para valores muito próximos de zero, a probabilidade de a rede estar dividida em comunidades é baixa. Por sua vez, para valores cada vez mais positivos, essa probabilidade aumenta, ou seja, a “qualidade” das divisões da rede em comunidades aumenta. Nesse sentido, busca-se pelo valor mais positivo possível para a detecção de comunidades em uma rede (NEWMAN, 2006). De fato, valores iguais ou maiores que 0,3 já são considerados significativos (BOTELHO; SOUSA, 2011).

Apesar de ser um algoritmo muito utilizado, que traz resultados satisfatórios e cujo tempo computacional de processamento é considerado mais rápido em comparação ao algoritmo GN, alguns pesquisadores consideram a medida imprecisa por estar baseada na diferença entre o proposital e o aleatório (BOTELHO; SOUSA, 2011).

CAPÍTULO 2

Interações intermoleculares e sua importância no ensino de Química

O modelo aceito atualmente para a constituição da matéria afirma que ela é formada de partículas, átomos, íons ou moléculas, que interagem entre si. Dessas interações, surgem consequências fundamentais para a compreensão do mundo macroscópico. Rocha (2001) apresenta o conceito de interação como o comportamento de atração e repulsão das moléculas, sem que haja rompimento ou formação de ligações químicas. Mais adiante, o autor complementa essa definição ao afirmar que “as interações intermoleculares surgem devido às forças intermoleculares, que são essencialmente de natureza elétrica, e fazem com que uma molécula influencie o comportamento de outra molécula em suas proximidades” (ROCHA, 2001, p. 33).

A compreensão da natureza corpuscular da matéria é importante para descrever e explicar sua estrutura nos diversos estados termodinâmicos em que se apresenta (sólido, líquido e gasoso, por exemplo), suas propriedades físicas, e todas as mudanças que possam ocorrer em sua estrutura, tanto físicas quanto químicas (POZO; CRESPO, 2009). Essas diferenças entre os estados, suas propriedades e as mudanças possíveis estão relacionadas aos tipos de interação existentes, que variam conforme os tipos de partícula presente.

As interações do tipo íon-íon são interações eletrostáticas fortes, nas quais as espécies químicas envolvidas são cátions e ânions, cujas cargas elétricas são positivas e negativas, respectivamente. Nas interações íon-dipolo, uma das espécies químicas presentes é uma molécula polar que, em razão do momento de dipolo elétrico, μ , não nulo que surge pelas diferenças de eletronegatividade entre os átomos, apresenta cargas parciais positivas (δ^+) e negativas (δ^-), constituindo assim um dipolo elétrico. As interações do tipo dipolo permanente-dipolo induzido ocorrem entre uma molécula polar e uma molécula apolar. Nesse caso, o dipolo elétrico permanente da molécula polar pode induzir a formação de um dipolo na molécula apolar, e a intensidade dessa interação vai depender da polarizabilidade, α , uma propriedade que mede a facilidade de distorção da nuvem eletrônica de uma molécula por um campo elétrico, que pode ser devido à aproximação de uma espécie carregada (IUPAC, 1997). Quando duas moléculas apolares interagem, portanto, formam-se dipolos elétricos instantâneos, que permitem que haja uma interação atrativa entre elas, cuja intensidade vai depender novamente da polarizabilidade. Esse tipo de interação, conhecido como força dispersiva de London, em homenagem ao cientista que as estudou – Fritz London –, está presente em todas as moléculas. Um aspecto importante das forças de London é seu efeito cumulativo que varia proporcionalmente

com o número de contatos moleculares presentes na molécula (ROCHA, 2001). Por esse motivo, moléculas “cilíndricas” vão interagir mais fortemente do que moléculas “esféricas”. Finalmente, as ligações de hidrogênio ocorrem entre moléculas nas quais há um átomo aceptor, que apresenta um par de elétrons não compartilhado, e um átomo doador, ao qual está ligado um átomo de hidrogênio. Ambos os átomos, aceptor e doador, devem ser bastante eletronegativos, fazendo surgir uma carga elétrica parcial positiva no átomo de hidrogênio, favorecendo a intensidade da interação.

Como foi descrito acima, as interações intermoleculares apresentam características distintas, que variam em função da natureza da interação e das espécies químicas envolvidas. No entanto, como afirmou Rocha (2001), todas apresentam em comum o fato de variarem com o inverso da distância que separa as partículas, sendo mais fortes para pequenas distâncias. Outros aspectos relacionados, por exemplo, à orientação espacial e à rotação contribuem para o fator de aproximação entre as moléculas que, conseqüentemente, tem influência na intensidade das interações.

Por estarem relacionadas às propriedades físicas da matéria e à formação das diferentes fases, as interações intermoleculares se apresentam como um tema transversal da Química, sendo fundamental na formação do profissional da área, seja para sua atuação como docente na Educação Básica, seja no Ensino Superior, na indústria ou na academia como pesquisador (JUNQUEIRA, 2017).

A importância das interações intermoleculares para a Química em suas diferentes áreas se mostra em várias ocasiões. Sem contar a Educação Básica – onde o estudo do tema é feito sem aprofundamentos, mas se justifica ao mostrar principalmente as relações existentes entre as interações intermoleculares e as propriedades físicas –, as interações intermoleculares estão presentes nas diferentes áreas da Química – Química Geral, Química Orgânica, Bioquímica, Química Analítica e Físico-química – com inúmeras aplicações. Para citar um exemplo, as biomoléculas, como o DNA e as proteínas, mantêm suas estruturas tridimensionais estáveis por conta das interações intermoleculares presentes (ROCHA, 2001). Atkins e Jones (2012) também citam um exemplo da importância das interações intermoleculares para as propriedades macroscópicas ao afirmarem que as ligações de hidrogênio são responsáveis por manter unidas moléculas vizinhas de celulose, que essa interação confere a resistência da madeira.

Apesar da importância do tema, ele é apresentado na maioria das vezes com ênfase na classificação dos diferentes tipos de interação (REIS, 2008), geralmente de forma fragmentada, não contribuindo para que os alunos tomem consciência da centralidade para o conhecimento químico. Essa disposição, tradicionalmente existente nas práticas de ensino e em grande parte dos livros didáticos, pode dificultar o estabelecimento de relações entre os conceitos envolvidos (JUNQUEIRA, 2017).

Junqueira (2017) fez uma revisão bibliográfica sobre trabalhos que abordam o tema interações intermoleculares, com o objetivo de levantar o que tem sido estudado a respeito na área de Ensino de Química. Esse levantamento abrangeu estudos relativos às concepções dos estudantes, às propostas de ensino e à análise do tema em livros didáticos. Desse levantamento, é apresentado aqui um breve resumo, procurando sintetizar algumas informações relevantes com relação às pesquisas sobre o tema em livros didáticos, escopo deste trabalho.

Os estudos sobre as concepções dos alunos para interações intermoleculares ainda não são tão expressivos na literatura, como para outros temas de ensino de Química (TARHAN et al., 2008; SCHMIDT; KAUFMANN; TREAGUST, 2009).

No Brasil, ao investigar as provas do vestibular da UNESP entre 1990 e 2006, verificou-se que o tema interações intermoleculares está entre os menos exigidos (SILVA et al., 2010).

Em livros didáticos, as análises sobre o tema são escassas. Pappa e Tsaparlis (2011) investigaram dez livros didáticos de Química Geral para verificar o tipo de conhecimento exigido em questões sobre ligações químicas e interações intermoleculares e constataram que o conceito de ligações químicas aparece antes do conceito de interações intermoleculares, sendo que este último aparece em diferentes ordens nos livros didáticos. A análise indicou que 93% das questões sobre o tema interações intermoleculares são objetivas, solicitam respostas curtas e diretas ou são questões de múltipla escolha. Na maioria das questões os alunos dificilmente precisam refletir sobre a situação, justificar e concluir (PAPPA; TSAPARLIS, 2011).

Há poucos trabalhos que exploraram a rede de conceitos sobre as interações intermoleculares e que fazem uma reflexão sobre o tema, sobre quais são os conceitos mais importantes e como eles se relacionam, com o objetivo de identificar as ideias fundamentais para o seu aprendizado, bem como trabalhos que discutam como o conteúdo está inserido numa determinada disciplina.

Assumindo a importância das interações intermoleculares para o conhecimento químico e a sua constante presença em um curso superior de Química, propõe-se estudar como esse tema é apresentado em livros didáticos, que são recursos que apresentam o conhecimento científico estabelecido.

2.1 Análise do tema presente no objeto de análise

Os livros didáticos aparecem no cenário educacional como um dos principais instrumentos que dão suporte aos docentes e estudantes no processo de ensino e aprendizagem de Química (LOPES, 1994). São bons recursos disponíveis para examinar a linguagem da ciência, apresentam o conhecimento científico estabelecido de forma bem organizada, são elaborados por um painel de especialistas (autores, editores, revisores, pesquisadores etc.) e utilizam uma linguagem específica e cuidadosamente selecionada para descrever os fenômenos, procurando evitar erros e prezando pelo rigor conceitual. Além disso, há uma ampla gama de manuais didáticos disponíveis, sendo fontes efetivas do conhecimento bem estruturado e bem embasado, com alto grau de coerência em termos do conhecimento científico (KOPONEN; PEHKONEN, 2010).

O manual didático escolhido para este trabalho faz parte da bibliografia básica da disciplina de Química Geral I dos cursos de Bacharelado e Licenciatura do Instituto de Química da USP, dos períodos integral e noturno. A saber, trata-se do livro de Química Geral *Princípios de Química geral: questionando a vida moderna e o meio ambiente* (ATKINS, JONES, 2012).

Do estudo feito por Junqueira (2017) foi possível extrair algumas conclusões importantes a respeito do tema e de como ele é apresentado no capítulo específico que trabalha as interações intermoleculares:

1. O tema é apresentado de forma classificatória seguindo uma ordem decrescente de intensidade, da interação íon-dipolo para a interação do tipo forças de London, com exceção da ligação de hidrogênio, que é considerada um tipo especial de interação intermolecular;
2. São definidos os conceitos de momento de dipolo permanente, momento de dipolo induzido, polaridade e polarizabilidade;

3. A maneira pela qual o capítulo apresenta os tipos de interação intermolecular pode trazer consequências para o aprendizado, uma vez que os alunos podem ter dificuldades em reconhecer que diferentes tipos de interação atuam no mesmo sistema de forma simultânea.

A estrutura do capítulo e a organização textual, ou seja, a ordem dos conteúdos apresentados, os termos utilizados para introduzir conceitos científicos, os dados e exemplos inseridos como forma de ilustrar certos fenômenos descritos refletem a linguagem científica e a forma de pensar o tema interações intermoleculares por parte dos autores (YUN; PARK, 2018). Segundo Reeves (2005), essa linguagem científica apresenta características linguísticas próprias formuladas com objetivos específicos (por exemplo, interpretar dados qualitativos ou quantitativos, desenvolver uma forma de pensamento científico, compartilhar um pensamento científico etc.) (WELLINGTON; OSBORNE, 2001).

Autores de livros de ciência – assim como professores de ciência –, estão familiarizados com essa linguagem específica, o que não necessariamente acontece com os alunos desses cursos, que precisam ser guiados nessa jornada de assimilação da linguagem científica (YUN; PARK, 2018). Nesse sentido, a aquisição de vocabulário (conceitos) próprio é fundamental para aquisição do conhecimento científico específico (MILLER, 1991). Entretanto, esse processo não deveria considerar as palavras isoladamente, mas, sim, a função de cada uma e a relação que exercem entre si na estrutura semântica formada por elas (LANGACKER, 1997), chamada de rede semântica (ou rede conceitual) (COLLINS; QUILLIAN, 1969; MARSLEN, 1987). Segundo Ausubel (2000), a aprendizagem de um conceito científico implica estabelecer as conexões corretas com os demais conceitos (nós) da rede conceitual.

Com base nos referenciais apresentados, conclui-se que o estudo das métricas de análise de rede pode ser útil para determinar a estrutura relacionada ao conhecimento químico das interações intermoleculares, identificando os nós dessa rede, como eles estão relacionados, e se essas relações ressaltam informações importantes sobre esse tema, tudo isso à luz da ideia de que o conhecimento pode ser interpretado como uma rede.

CAPÍTULO 3

Objetivos

Acredita-se que a obtenção da estrutura conceitual sobre um tema que tem como material de partida textos escritos – no caso deste trabalho, um texto extraído de livro didático –, permite verificar de forma visual, global e sintética as principais relações conceituais existentes, se há domínios ou grupos de conceitos mais relacionados, mas também pode auxiliar na identificação dos conceitos mais centrais, como sendo aqueles que fazem mais ligações com outros ou que intermedeiam diferentes grupos de conceitos. Além disso, verificar também a localização de certos conceitos na rede considerados como importantes do ponto de vista químico, e quais pares de conceitos apresentam alta coocorrência, ou seja, estão próximos e presentes em várias unidades de análise (frases).

Assumindo a importância das interações intermoleculares para o conhecimento químico, a aprendizagem desse conteúdo se faz necessária para a compreensão de uma série de fenômenos em Química. Por exemplo, a formação dos estados físicos da matéria é consequência das interações intermoleculares; a maneira como as propriedades físicas variam também pode ser explicada pelas diferentes interações que ocorrem entre as moléculas que formam as substâncias. Outros exemplos relacionados a aspectos estruturais também podem ser citados. Nesse contexto, os sistemas biológicos são intimamente influenciados pelas interações intermoleculares, responsáveis por manter a estrutura de moléculas como as enzimas, cuja estrutura tridimensional está relacionada com a atividade biológica, ou o DNA, cuja estrutura de dupla-hélice se mantém graças à formação de ligações de hidrogênio entre os pares de base (ROCHA, 2001). Até mesmo para compreender as propriedades moleculares que são responsáveis pelos diferentes tipos de interação.

No entanto, apesar de sua importância e de sua centralidade, é sabido que esse tema é pouco estudado, especialmente com relação ao levantamento da estrutura conceitual que o descreve. Quanto à aprendizagem, Pozo e Crespo (2009) afirmam que os estudantes têm dificuldade em compreender o conhecimento científico, em especial o químico, uma vez que exige alta demanda cognitiva, trabalha com modelos e utiliza conceitos abstratos, tem uma linguagem própria e estabelece relações entre níveis macroscópicos e submicroscópicos que não são habilidades cotidianas. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é obter a estrutura conceitual do conhecimento sobre as interações intermoleculares presente em um livro didático, referência nos cursos iniciais de Química Geral. Com isso, espera-se ser possível evidenciar as relações conceituais mais importantes, de modo a favorecer uma maior

compreensão do tema. Para isso, foi necessário delinear alguns objetivos específicos que permitiram atingir o objetivo geral. São eles:

1. Identificar os conteúdos conceituais tendo como base o referencial de Pozo e Crespo (2009), verificando como os fatos e os conceitos se apresentam no texto, e se os princípios são identificados de forma explícita ou se exigem uma compreensão das relações conceituais presentes, uma vez que esse tipo de conteúdo conceitual pode não estar evidente.
2. Desenvolver uma estratégia metodológica que permita obter a estrutura conceitual presente no texto, por meio do uso de softwares de análise de texto e de análise de redes, e aplicando um tratamento no texto de modo que possa ser analisado por esses softwares. Nesse sentido, é razoável esperar que essa estratégia possa ser aplicada em outros textos, ou mesmo em um conjunto de textos, nos quais se deseja fazer o mesmo tipo de análise.
3. Aplicar as métricas de análise de redes como ferramentas para analisar a estrutura de conhecimento e verificar se esse referencial ajuda a evidenciar as relações conceituais mais importantes para o tema interações intermoleculares. Esta etapa visa explorar essas métricas, inclusive com o uso de software específico, procurando entender o significado de cada uma, como elas se relacionam e se as relações conceituais que se destacam podem mostrar as ideias mais importantes para o tema que, no contexto do ensino, deveriam ser o foco da aprendizagem para a melhor compreensão das interações intermoleculares.

CAPÍTULO 4

Descrição e análise preliminar do texto didático

Junqueira (2017) fez um estudo bastante detalhado sobre o material que serviu de base para a compreensão do conteúdo analisado e da visão de ensino de Química apresentada. Segundo Atkins e Jones (2012, p. VII), o livro “foi concebido como um curso rigoroso de Química introdutória. Seu objetivo central é desafiar os estudantes a pensar e a questionar e, também, adquirir conhecimento sólido dos princípios da Química”. Está claro por esta afirmação que os autores esperam que os alunos aprendam a refletir e a questionar o conhecimento apresentado, tornando-se ativos no processo de aprendizagem. Dessa forma, entende-se que a visão que os autores têm e que apresentam sobre o tema interações intermoleculares deve auxiliar os alunos na aprendizagem de princípios da Química.

4.1 Características gerais do objeto de análise

O livro inicia com uma seção chamada “Fundamentos”, cujo objetivo é fazer uma revisão geral das ideias básicas da Química que possa auxiliar os alunos durante o curso ou para alguma revisão rápida antes da leitura dos capítulos principais. Essa seção está organizada em 13 pequenos capítulos, a saber: A) Matéria e energia; B) Elementos e átomos; C) Compostos; D) Nomenclatura de compostos; E) Mols e massas molares; F) Determinação das fórmulas químicas; G) Misturas e soluções; H) Equações químicas; I) Soluções em água e precipitação; J) Ácidos e bases; K) Reações redox; L) Estequiometria das reações; e M) Reagentes limitantes.

Após a seção “Fundamentos”, o livro se divide em 19 capítulos, em cada um dos quais é desenvolvido um conteúdo específico da Química. O tema abordado neste trabalho, as interações intermoleculares, está presente em diferentes capítulos do livro, sendo apresentado com diferentes abordagens dependendo do contexto, tratando-se de um conteúdo bastante relevante para o conhecimento químico (JUNQUEIRA, 2017). No entanto, o tema é apresentado formalmente após o estudo dos gases, no capítulo “Líquidos e sólidos”, quando se estudam os diferentes tipos de interação intermolecular. Esse momento de apresentar o conteúdo pode indicar a visão dos autores na construção do conhecimento: partindo de um modelo mais simples de constituição da matéria, os gases, na qual as partículas não interagem, para um modelo mais complexo, os líquidos e sólidos, nos quais as partículas

interagem, e essa interação é responsável pelas características desses estados físicos.

O capítulo “Líquidos e sólidos” tem um total de 33 páginas e seu conteúdo está dividido em quatro seções: 1) Forças intermoleculares; 2) Estrutura dos líquidos; 3) Estrutura dos sólidos; e 4) Impacto sobre os materiais.

Na abertura do capítulo – assim como para os demais capítulos do livro – há uma introdução, cujo objetivo é situar o leitor sobre o que será estudado, apresentando informações importantes sobre o tema. É na introdução que o leitor tem o primeiro contato com o tema do capítulo, e nesse trecho, os autores, por meio de perguntas, apresentam ao leitor:

- a) as ideias principais que resumem, de certa maneira, os princípios relacionados ao tema (Quais são as ideias importantes?);
- b) alguns fatos que justificam estudar o tema (Por que precisamos estudar este assunto?);
- c) quais são os pré-requisitos, ou seja, os conteúdos necessários – e que devem ter sido estudados anteriormente – para compreender o assunto do capítulo (O que devemos saber para entender este capítulo?).

Em seguida, é apresentado um panorama geral do que será estudado no capítulo, do que foi estudado anteriormente sobre gases e interações coulômbicas, e que justifica o aprofundamento com as interações intermoleculares, além de trazer alguns exemplos que mostram a importância das forças intermoleculares na definição das propriedades físicas da matéria.

Após a introdução, a seção 1 é iniciada com o estudo de formação das fases condensadas no primeiro tópico, seguido do estudo de cada tipo de interação intermolecular nos tópicos seguintes, pela ordem: Formação de fases condensadas; Forças íon-dipolo; Forças dipolo-dipolo; Forças de London; e Ligação hidrogênio.

Para este trabalho, todas as etapas desenvolvidas para a obtenção da estrutura semântica foram realizadas selecionando os trechos do capítulo referentes à introdução e à seção 1. As seções de 2 a 4 não foram consideradas no escopo da pesquisa.

4.2 Descrição do capítulo sobre interações intermoleculares

4.2.1 Formação de fases condensadas

Neste tópico, é abordada a formação de fases condensadas, apresentando o que são e como são formadas. Aqui, são definidos os conceitos de fase e de fases condensadas, como consequência das interações entre as partículas. Na sequência, uma tabela resume os tipos de interação intermolecular e apresenta os dados de energias típicas e das espécies envolvidas, permitindo compará-los, como mostra a Figura 14.

Figura 14 – Resumo dos dados de energia e espécies químicas das forças interiônicas e intermoleculares

TABELA 5.1 Forças Interiônicas e Intermoleculares*

Tipo de interação	Energia típica (kJ·mol ⁻¹)	Espécies que interagem
íon-íon	250	somente íons
íon-dipolo	15	íons e moléculas polares
dipolo-dipolo	2	moléculas polares estacionárias
	0,3	moléculas polares em rotação
dipolo-dipolo induzido	2	pelo menos uma molécula deve ser polar
London (dispersão)†	2	todos os tipos de moléculas
ligação hidrogênio	20	moléculas que contêm N, O, F; a ligação é um átomo H compartilhado

*A interação total experimentada por uma espécie é a soma de todas as interações das quais ela participa.

†Também conhecido como interação dipolo induzido-dipolo induzido.

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 270).

Para cada tipo de interação intermolecular são apresentadas a energia típica que indica a força dessa interação e as características das espécies que interagem. É uma forma classificatória de organização, mas que permite ressaltar aspectos específicos de cada tipo. Por exemplo, percebe-se que a interação do tipo dipolo-dipolo ocorre sempre entre moléculas polares; no entanto, essas moléculas podem ser estacionárias ou estar em rotação, e essa característica vai influenciar na energia da interação. Ao comparar as energias típicas é possível perceber também que as interações que envolvem espécies polares ou íons são mais fortes do que aquelas que envolvem espécies apolares ou cujas cargas elétricas são parciais. A ligação de hidrogênio, por exemplo, é a mais forte das interações intermoleculares, seguida pela

interação do tipo íon-dipolo (a exceção é a interação íon-íon, que é predominante em compostos iônicos).

Em seguida, o texto apresenta a expressão da energia potencial entre duas cargas elétricas:

$$E_p = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6)$$

em que:

q_1 e q_2 = cargas elétricas das partículas envolvidas;

ϵ_0 = constante dielétrica do meio, ou seja, reflete a tendência dele em blindar uma carga da outra;

r = distância que separa as duas cargas.

Essa expressão descreve a natureza eletrostática das interações intermoleculares e mostra que a energia potencial é proporcional ao produto das cargas elétricas das partículas que interagem e inversamente proporcional à distância que separa essas partículas.

Os autores apresentam também um gráfico (Figura 15) como forma de ilustrar a dependência da energia potencial em função da distância, para as interações intermoleculares que serão abordadas no capítulo.

Figura 15 – Gráfico da dependência da energia potencial em função da distância entre as partículas

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 270).

Neste gráfico, cada curva descreve a variação da energia potencial em função da distância entre as partículas. Em vermelho, a interação íon-íon é influenciada por um fator $\frac{1}{r}$ da distância. Em marrom, a curva mostra que a interação íon-dipolo tem uma dependência maior com a distância, por um fator $\frac{1}{r^2}$. Em verde e em azul, as curvas descrevem a variação da energia potencial para a interação entre dipolos estacionários e entre dipolos em rotação, respectivamente. Nesse sentido, a dependência da distância para a energia potencial tem um fator $\frac{1}{r^3}$ para dipolos estacionários e $\frac{1}{r^6}$ para dipolos em rotação.

Ficou claro que a influência da distância é menor quanto maiores forem as cargas envolvidas na interação, e essa influência aumenta conforme a intensidade das cargas diminui, sendo necessário que as partículas estejam mais próximas para que a interação entre elas seja efetiva.

Por fim, o texto finaliza com a ideia principal do tópico, de que “quando forças atrativas juntam as moléculas, formam-se fases condensadas” (ATKINS; JONES, 2012, p. 270). Baseando-se nas ideias de Pozo e Crespo (2009), é razoável apontar essa ideia como um princípio fundamental sobre o tema, que afirma que só existem fases condensadas, ou seja, líquidos e sólidos, porque as moléculas interagem e se atraem, evidenciando esse fenômeno de interação existente entre as partículas que constituem a matéria.

Na sequência, os demais tópicos estão organizados da mesma maneira: apresentação do tipo de interação intermolecular com o uso de exemplos e dados, descrição das características da interação, definição da equação de energia potencial que a descreve quantitativamente e síntese das ideias principais apresentadas no tópico para a interação estudada.

4.2.2 Forças íon-dipolo

Este tópico se inicia definindo o fenômeno da hidratação de íons em água e seu objetivo é apresentar as características da interação íon-dipolo, que ocorre em função das cargas elétricas dos íons e das cargas parciais de solventes polares, no caso, a água. Na Figura 16, as representações ilustram a hidratação de íons por moléculas de água.

Figura 16 – Representação da hidratação de íons. Em (a), tem-se um cátion hidratado e, em (b), tem-se um ânion hidratado

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 271).

Na hidratação, os íons estão rodeados por moléculas de água que, por serem polares, interagem com a carga elétrica da espécie iônica. No caso do cátion, as moléculas de água mantêm seus átomos de oxigênio, cuja carga elétrica parcial é negativa, voltados para o íon. Já no ânion, as moléculas de água mantêm os átomos de hidrogênio voltados para o íon, uma vez que a carga elétrica parcial é positiva. A imagem deixa claro essa interação entre os íons e as cargas parciais das moléculas de água, respeitando, inclusive, as diferenças de tamanho entre o cátion (roxo) e o ânion (verde).

A energia potencial é descrita quantitativamente por meio da equação

$$E_p \propto -\frac{|z|\mu}{r^2} \quad (7)$$

indicando ser proporcional ao produto do módulo da carga do íon, $|z|$, pelo momento de dipolo elétrico da molécula polar, μ , e inversamente proporcional à distância elevada ao quadrado entre essas partículas. O sinal negativo indica que a energia potencial diminui pela interação com o solvente polar. O fator $\frac{1}{r^2}$ no denominador mostra que a dependência da distância entre as partículas é maior do que nas interações íon-íon. Ou seja, na interação íon-dipolo, as partículas precisam estar mais próximas para que a interação aconteça. É introduzida aqui a propriedade molecular momento de dipolo, relacionada à polaridade da molécula. Dessa forma, pode-se concluir que quanto maior for o momento de dipolo, maior será a energia potencial da interação.

Exemplos de sais hidratados são apresentados para ilustrar as características que influenciam nesse tipo de interação; a carga elétrica e o tamanho dos íons

determinam a extensão da hidratação dos sais formados. Portanto, quanto maior for o íon e quanto menor for sua carga elétrica, mais fraca deve ser a interação entre esta espécie e a molécula polar.

Ao final, da mesma forma que para o tópico anterior, o texto sintetiza as ideias apresentadas ao afirmar que nas interações íon-dipolo é possível formar sais hidratados e que essa hidratação depende da carga elétrica do íon e do raio da espécie: “As interações íon-dipolo são fortes para íons pequenos com carga elevada. Em consequência, os cátions pequenos com carga elevada formam, frequentemente, compostos hidratados” (ATKINS; JONES, 2012, p. 271).

4.2.3 Forças dipolo-dipolo

Neste tópico, são apresentadas as interações que ocorrem entre moléculas polares, nas quais há formação de dipolos elétricos. Os dipolos interagem por meio das cargas elétricas parciais opostas, como mostra a Figura 17.

Figura 17 – Representação da interação dipolo-dipolo entre moléculas polares

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 271).

Os momentos de dipolo elétrico estão representados pelas setas. Na interação dipolo-dipolo, as moléculas interagem por meio das cargas parciais opostas. No caso das orientações enfileiradas, como mostra a representação inferior, a interação é mais fraca.

Da mesma forma que nos tópicos anteriores, neste são descritas as características da interação com exemplos ilustrativos. Em seguida, a expressão da energia potencial é definida como segue:

$$E_p \propto -\frac{\mu_1 \mu_2}{r^3} \quad (8)$$

Por se tratar de uma interação entre dois dipolos, a propriedade molecular que está relacionada à força dessa interação é o momento de dipolo elétrico considerado, desta vez, para as duas moléculas presentes. Da mesma forma que a interação íon-dipolo, quanto maior for o momento de dipolo, maior será a polaridade das moléculas e, conseqüentemente, mais forte será a interação. Entretanto, o fator $\frac{1}{r^3}$ indica que essa energia cai mais rapidamente que para as outras interações.

Neste tipo de interação, há uma particularidade apresentada no texto, que é o fato de as moléculas estarem em rotação, cujo fenômeno é apresentado na Figura 18.

Figura 18 – Representação da interação dipolo-dipolo na qual uma das moléculas está em rotação

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 272).

Nesta situação, a interação é favorecida quando as moléculas se encontram na orientação de menor energia, no caso, com os dipolos elétricos opostos alinhados, permitindo uma interação atrativa entre os polos de cargas opostas. A rotação, portanto, influencia a intensidade da interação, que é menor, e a equação (8) é alterada de forma a levar esse fator em consideração:

$$E_p \propto -\frac{\mu_1^2 \mu_2^2}{r^6} \quad (9)$$

A equação (9) mostra que, para moléculas em rotação, a influência da distância na energia potencial é muito mais sensível do que para as moléculas estacionárias por um fator de $\frac{1}{r^6}$. Ou seja, a interação dipolo-dipolo em moléculas em rotação só é importante quando elas estão muito próximas.

Os exemplos que procuram ilustrar as características dessa interação, neste tópico, são apresentados na forma de um exercício resolvido e de exercícios para que os alunos resolvam, exigindo um grau de raciocínio maior para a compreensão da interação dipolo-dipolo. Nos dois tipos de exercício, o enunciado pede para determinar qual composto dentre dois apresentados terá maior temperatura de ebulição. Para a resolução, os alunos devem relacionar a intensidade das interações entre as moléculas do composto com a temperatura de ebulição da substância, no contexto das interações dipolo-dipolo. Para isso, é necessário analisar os momentos de dipolo elétrico das ligações da molécula e determinar se o momento de dipolo elétrico resultante é nulo ou não, pois esse fator determina a intensidade das interações entre dipolos elétricos e, conseqüentemente, o valor de temperatura de ebulição.

Por fim, as ideias principais sintetizam o tópico e afirmam que apenas moléculas polares interagem por meio de dipolos, estejam elas estacionárias ou em rotação. O momento de dipolo é uma propriedade importante, pois define a existência ou não de um dipolo elétrico e, por serem mais fracas que as interações anteriores, a dependência com a distância é muito maior.

4.2.4 Forças de London

Até este momento foram apresentadas interações intermoleculares nas quais as espécies envolvidas são polares e há uma carga elétrica total envolvida, por exemplo, nas interações íon-dipolo, ou a formação de um dipolo elétrico em decorrência de cargas parciais, como nas interações dipolo-dipolo. As forças de London, no entanto, explicam a existência de interações atrativas em moléculas apolares e nos gases nobres, que são monoatômicos, pela formação de dipolos elétricos instantâneos. Para isso, introduz-se um conceito importante e inédito até então: a polarizabilidade, α . Essa propriedade molecular representa a facilidade com a qual a nuvem eletrônica das moléculas pode ser deformada, permitindo a formação

de dipolos elétricos instantâneos que, por sua vez, vão promover a interação. A Figura 19 procura ilustrar esse fenômeno.

Figura 19 – Representação da interação do tipo forças de London entre duas moléculas cujas nuvens eletrônicas foram deformadas fazendo surgir dipolos instantâneos

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 273).

Nessa representação, o momento de dipolo formado distorce a nuvem eletrônica de moléculas vizinhas, induzindo a formação de novos dipolos elétricos. Como resultado, as moléculas se atraem. Em outro instante, o momento de dipolo da primeira molécula se altera e, com isso, o momento de dipolo induzido da outra molécula também é alterado, mantendo a interação entre elas.

Para esse tipo de interação intermolecular, a polarizabilidade é o fator determinante e, portanto, a equação da energia potencial fica:

$$E_p \propto -\frac{\alpha_1 \alpha_2}{r^6} \quad (10)$$

As forças de London estão presentes em todos os tipos de molécula e sua intensidade depende do quanto a nuvem eletrônica das moléculas pode ser deformada. Dessa forma, moléculas volumosas, com grande número de elétrons, são mais polarizáveis do que moléculas menores; consequentemente, a intensidade das forças de London será maior nelas do que nas moléculas menores.

Outra característica das forças de London é a influência da geometria das moléculas. Para moléculas com estrutura mais linear e de cadeia mais longa, os momentos de dipolo instantâneos interagem mais fortemente do que em moléculas com

geometria mais esferoidal, nas quais as regiões de contato das nuvens eletrônicas são menores (Figura 20).

Figura 20 – Representação da interação do tipo forças de London. Em (a), tem-se dipolos de duas moléculas cilíndricas e, em (b), tem-se dipolos de duas moléculas esféricas

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 275).

Nas moléculas lineares ou de geometria mais cilíndrica, a interação entre as nuvens eletrônicas é mais eficiente, pois a região para que ocorra a interação é maior. Nas moléculas menores de geometria mais esférica, essa interação é menos intensa, pois as regiões de contato entre elas são menores.

Novamente, há um exercício resolvido e exercícios para serem resolvidos com exemplos que ilustram a influência das forças de London nas propriedades físicas, exigindo maior raciocínio por parte dos alunos. Nesse caso, a resolução depende da compreensão de como atuam as forças de London para prever a influência sobre as propriedades físicas, no caso, a temperatura de ebulição.

A síntese do tópico ressalta que as forças de London estão presentes em todos os tipos de molécula e que depende do número de elétrons e da polarizabilidade.

4.2.5 Ligação hidrogênio

O último tipo de interação intermolecular trata da ligação de hidrogênio, a mais forte das interações e específica para certos tipos de molécula. O texto apresenta como característica mais importante dessa interação a presença de um átomo de hidrogênio ligado a um átomo bastante eletronegativo (geralmente flúor, oxigênio e nitrogênio). Nesses casos, forma-se uma ligação fortemente polarizada com carga

parcial positiva no átomo de hidrogênio. A interação se forma entre o par de elétrons não compartilhado do átomo eletronegativo de uma molécula e o átomo de hidrogênio ligado a um desses átomos muito eletronegativos de outra molécula. A Figura 21 representa a ligação de hidrogênio com destaque para a interação entre o átomo de oxigênio e o átomo de hidrogênio.

Figura 21 – Representação da ligação de hidrogênio

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 276).

A ligação de hidrogênio estabelecida entre o átomo de hidrogênio do grupo O—H e o átomo de oxigênio é representada por uma linha pontilhada (...).

Uma diferença deste tópico para os anteriores é que não há uma expressão matemática que descreve a energia dessa interação. Isso pode indicar que a ligação de hidrogênio tem natureza diferente das demais interações intermoleculares, que são de natureza eletrostática. Como é possível descrever as ligações de hidrogênio, então? Sobre essa questão, Arunan et al. (2011) publicaram uma recomendação da IUPAC de como definir as ligações de hidrogênio (ARUNAN et al., 2011, p. 1638):

A ligação de hidrogênio é uma interação atrativa entre um átomo de hidrogênio de uma molécula ou um fragmento molecular X—H, no qual X é mais eletronegativo que H, e um átomo ou um grupo de átomos na mesma molécula ou em uma molécula diferente, na qual existe evidência de formação de ligação.⁸

De fato, a natureza eletrostática da ligação de hidrogênio tem sido contestada por estudos (DINGLEY; GRZESIEK, 1988; ZHANG et al., 2013) que mostraram haver uma espécie de “comunicação” entre os núcleos que interagem por meio de ligação de hidrogênio, algo impossível nos limites do modelo eletrostático clássico (HERBST; MONTEIRO FILHO, 2019). Weinhold e Klein (2014) propuseram que as ligações de hidrogênio se assemelham a um sistema em que há formação de híbridos de

⁸ Traduzido do original por Herbst e Monteiro Filho (2019).

ressonância, assumindo mais um caráter de ligação covalente do que de interação eletrostática. A esse modelo, deram o nome de “ressonância intermolecular”. O esquema a seguir (Figura 22) representa esse modelo para a ligação de hidrogênio entre duas espécies (B e HA).

Figura 22 – Representação da ressonância intermolecular evidenciando a formação da ligação de hidrogênio

Fonte: Herbst e Monteiro Filho (2019).⁹

Os autores (ATKINS; JONES, 2012) não apresentam a ligação de hidrogênio como tendo natureza eletrostática, mas também não fornecem ferramentas para a compreensão dessa interação segundo o modelo de ressonância intermolecular apresentado por Weinhold e Klein (2014). Essa ausência de explicações mais aprofundadas pode dificultar a compreensão dos alunos sobre as ligações de hidrogênio, que continuarão reproduzindo o entendimento dessa interação como um tipo especial de interação dipolo-dipolo. Herbst e Monteiro Filho (2019), nesse sentido, propõe uma atualização desse tópico em livros didáticos e nas práticas pedagógicas dos cursos de Química.

Ao final do tópico, a ideia principal é a de que a ligação de hidrogênio ocorre entre um átomo de hidrogênio de uma molécula e o par de elétrons de um átomo muito eletronegativo (flúor, oxigênio e nitrogênio) de outra molécula, quando esse hidrogênio está ligado a um átomo bastante eletronegativo, sendo essa o tipo mais forte de interação intermolecular.

⁹ Elaborada com base em Weinhold e Klein (2014).

4.3 Considerações sobre o tema no capítulo

A maneira de organizar a seção 1, dividindo-a por tipo de interação, permite estudar as características específicas das interações intermoleculares e os principais conceitos relacionados a cada uma. O texto evidenciou as propriedades moleculares responsáveis por influenciar a intensidade das forças, por exemplo o momento de dipolo para as interações que envolvem moléculas polares (íon-dipolo e dipolo-dipolo) e, conseqüentemente a polaridade; e a polarizabilidade, relacionada às forças de London, cuja intensidade também depende da geometria das moléculas.

Com relação à natureza das interações, elas são eletrostáticas e descritas quantitativamente por uma expressão matemática. A exceção é a ligação de hidrogênio, cuja natureza é covalente e descrita pelo modelo de ressonância intermolecular proposto por Weinhold e Klein (2014). No entanto, o texto não deixa isso claro, e pode passar a ideia de que se trata de um tipo específico de interação dipolo-dipolo.

Com relação às forças de London, o texto apresenta a universalidade desse tipo de interação ao afirmar que atua em todas as moléculas; porém, não há uma discussão aprofundada sobre isso, sendo essa informação apresentada apenas em caráter de memorização.

Essa organização classificatória é uma forma convencionalmente existente em grande parte dos livros didáticos e em práticas de ensino, mas pode dificultar o estabelecimento de relações entre os conceitos envolvidos no tema e, conseqüentemente, a construção de modelos explicativos mais lógicos e coesos. Por exemplo, a organização por ordem decrescente de intensidade, pode passar a ideia de que as forças de London, que são mais fracas, são menos importantes do que outros tipos de interação (JUNQUEIRA, 2017). Outro problema da organização classificatória é a ideia de que as interações ocorrem isoladamente nas moléculas, ou seja, se um tipo está atuando, os demais não estão, quando na verdade, isso não acontece. A energia de interação entre duas moléculas tem que ser vista como um somatório de várias parcelas sendo cada uma correspondente a um tipo de interação (JASIEN, 2008). Para cada caso uma dessas parcelas pode ser mais significativa do que outra. Uma alternativa para explicar a contribuição dos diferentes tipos de interação pode ser a apresentação da equação da energia potencial total das interações intermoleculares:

$$U(r) = \frac{-2\mu^4}{3k_B T r^6} + \frac{-3h\nu_0\alpha^2}{4r^6} + \frac{-2\mu^2\alpha}{r^6} \quad (11)$$

Nessa equação, o primeiro termo corresponde às interações do tipo dipolo-dipolo, o segundo termo corresponde às forças de London e o terceiro, às forças de atração de indução (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010). Embora represente as energias envolvidas na interação entre duas moléculas idênticas, pode ser aplicada para a interação de moléculas distintas, e evidencia a natureza aditiva das interações dipolo-dipolo e das forças de London.

CAPÍTULO 5

Identificação dos conteúdos conceituais

5.1 Identificação dos princípios do texto

Sobre os princípios enquanto conteúdos conceituais, Pozo e Crespo (2009, p. 79 e 80) afirmam que

Os princípios seriam conceitos muito gerais, com um grande nível de abstração, que geralmente são subjacentes à organização conceitual de uma área, embora nem sempre sejam suficientemente explícitos. [...] conceitos tais como os de conservação e equilíbrio são algo mais que conceitos específicos, pontuais, que podem ser objeto de estudo em uma unidade ou bloco de unidades concretas. São princípios que atravessam todos os conteúdos dessas disciplinas e cuja compreensão deve ser um dos objetivos essenciais [...]. Dificilmente é possível compreender noções mais específicas sem dominar esses princípios, de maneira que uma das metas últimas seria a assimilação ou construção, por parte dos alunos, desses princípios ou conceitos estruturais, aos quais eles devem ter acesso pela via dos conteúdos conceituais específicos das disciplinas, que constituem a lista habitual de conteúdos relativos a conceitos [...].

No contexto da Química, os autores defendem a ideia da natureza da matéria como um sistema de partículas que interagem, sendo esse um princípio fundamental que deve ser ensinado. Nesse sentido, o próprio conceito mais geral de interações intermoleculares se constitui em um princípio fundamental da Química, necessário para a compreensão, por exemplo, das propriedades físicas da matéria, mas também de como se formam os estados físicos, ou seja, de como essas interações influenciam o mundo macroscópico.

Segundo a definição acima, os princípios são ideias mais gerais que estão por trás da forma de pensar e organizar as ideias de toda uma área ou disciplina. Assim, não se caberia pensar em princípios para assuntos específicos dentro de uma dada disciplina, como é o tema interações intermoleculares dentro da Química. A própria ideia de que os fenômenos químicos se dão submicroscopicamente por meio de processos em que as partículas interagem entre si, reativamente ou não, é, como dito no parágrafo anterior, um princípio central na Química. No entanto, procurou-se no texto por ideias que, apesar de estarem em um contexto mais restrito, de interações não reativas entre as partículas, são ainda bem gerais e importantes deste contexto, a ponto de, em certa forma, orientarem e organizarem as relações entre os conceitos mais específicos do tema e organizarem uma explicação correta sobre os fenômenos envolvidos.

Na organização do capítulo “Líquidos e sólidos” (ATKINS; JONES, 2012), os autores apresentam, ao final de cada tópico, uma síntese das principais ideias estudadas.

Com base nas definições de Pozo e Crespo (2009) para os conteúdos conceituais, pode-se afirmar que essas sínteses seriam, a priori, possíveis candidatas aos princípios conceituais, e que, juntas, constituiriam as ideias mais importantes e necessárias para a compreensão do princípio da interação. O Quadro 3, a seguir, apresenta os possíveis princípios presentes em cada um dos tópicos da seção 1 do capítulo.

Quadro 3 – Possíveis princípios extraídos do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012)

Tópico	Trechos extraídos do texto	Princípios conceituais
Introdução	“Os materiais do futuro serão formulados com base na compreensão de como o arranjo de seus átomos e moléculas determinam as suas propriedades. Os cientistas entendem e inventam novos materiais levando em conta as propriedades e interações das partículas e como elas influenciam suas propriedades” (p. 269)	Os arranjos dos átomos e moléculas determinam as propriedades destas partículas, que determinam as interações atrativas e repulsivas entre as mesmas e, conseqüentemente, as propriedades macroscópicas dos materiais por elas constituídos.
Formação de fases condensadas	“Quando forças atrativas juntam as moléculas, formam-se fases condensadas.” (p. 270) “A temperatura na qual um gás se condensa para formar um líquido ou um sólido depende da pressão e da intensidade das forças atrativas entre as moléculas.” (p. 270)	As fases condensadas da matéria são uma consequência das forças intermoleculares.
	“Todas as interações interiônicas e quase todas as interações intermoleculares podem ser atribuídas, em grande parte, às interações coulômbicas entre duas cargas e neste capítulo utilizaremos muito a expressão da energia potencial, E_p , entre duas cargas, q_1 e q_2 , separadas por uma distância r ” (p. 270)	Todas as interações são de natureza eletrostática e sua energia decai com o aumento da distância entre as moléculas.
Forças íon-dipolo	“As interações íon-dipolo são fortes para íons pequenos com carga elevada. Em consequência, os cátions pequenos com carga elevada formam, frequentemente, compostos hidratados.” (p. 271)	A força da interação íon-dipolo depende da relação carga/volume do íon.

(Continua)

(Continuação)

Tópico	Trechos extraídos do texto	Princípios conceituais
Forças dipolo-dipolo	<p>“As moléculas polares participam de interações dipolo-dipolo, que decorrem da atração entre as cargas parciais de suas moléculas. As interações dipolo-dipolo são mais fracas do que as forças entre íons e caem rapidamente com a distância, especialmente nas fases líquida e gás, em que as moléculas estão em rotação.” (p. 272)</p> <p>“[...] as interações dipolo-dipolo dependem somente da polaridade das moléculas, e não de sua identidade química.” (p. 275)</p>	<p>As diferenças de distribuição de cargas na molécula levam a interações intermoleculares de natureza eletrostática.</p> <p>Interações dipolo-dipolo ocorrem apenas com moléculas dipolares.</p>
Forças de London	<p>“As interações de London são ‘universais’ no sentido em que elas se aplicam a todas as moléculas, independentemente de sua identidade química.” (p. 275)</p> <p>“[...] as interações entre moléculas de geometria cilíndrica são mais fortes do que entre moléculas de geometria esférica com o mesmo número de elétrons.” (p. 274)</p> <p>“As interações de London surgem da atração entre os dipolos elétricos instantâneos de moléculas vizinhas e agem em todos os tipos de moléculas. Sua energia aumenta com o número de elétrons. Elas se superpõem às interações dipolo-dipolo. Moléculas polares também atraem moléculas não polares através de interações fracas dipolo-dipolo induzido.” (p. 275)</p>	<p>Forças de London são universais, agem em todas as moléculas, tanto nas polares quanto nas apolares.</p> <p>As intensidades das forças de London aumentam com a massa molecular devido ao consequente aumento do número de elétrons na molécula.</p> <p>A estrutura geométrica da molécula define a força da interação.</p>

(Continua)

(Continuação)

Tópico	Trechos extraídos do texto	Princípios conceituais
Ligação hidrogênio	<p>“A ligação hidrogênio, que ocorre quando átomos de hidrogênio estão ligados a átomos de oxigênio, nitrogênio e flúor, é o tipo mais forte de força intermolecular.” (p. 276)</p> <p>“A existência de uma interação especial começa a ficar aparente quando analisamos os pontos de ebulição de compostos binários [...]” (p. 275)</p> <p>“A interação forte responsável pelos altos pontos de ebulição dessas e de outras substâncias é devido à chamada ligação hidrogênio. Apesar do nome [...] não é uma ligação covalente [...] na qual um átomo de hidrogênio fica entre dois átomos pequenos, fortemente eletronegativos, que têm pares isolados de elétrons, principalmente N, O ou F [...] uma das moléculas [...] cede o átomo H, e, a outra, um átomo O, N ou F que cede o par isolado de elétrons.” (p. 275)</p>	—

(Conclusão)

Fonte: autoria própria (2020).

Cada frase traz diferentes conceitos que se relacionam e evidenciam aspectos específicos das interações intermoleculares, dependendo do contexto. No tópico “Formação de fases condensadas”, por exemplo, o conceito de forças atrativas (ou forças de atração) se relaciona com os conceitos de molécula e de fases condensadas, e essa relação resume a ideia de formação de fases condensadas afirmando que são consequência das interações atrativas entre as moléculas.

No tópico “Forças íon-dipolo”, relacionam-se os conceitos de interações, íons (especificamente cátions) e carga, no sentido de carga elétrica. É possível identificar uma síntese das interações íon-dipolo, ao afirmar que a força da interação é alta caso o íon seja pequeno e tenha carga elevada. O fato de ser pequeno implica uma alta densidade eletrônica, que aumenta a energia de interação, e o fato de ter carga elétrica elevada contribui positivamente para a energia potencial da interação. No

entanto, isso não está claro e pode passar despercebido em uma leitura desatenciosa. O que se torna mais evidente é a exemplificação do fenômeno da hidratação ao reforçar que essas características descritas contribuem para a formação de compostos hidratados.

No tópico “Forças dipolo-dipolo”, há duas relações conceituais, uma em cada frase, que procuram sintetizar os aspectos desse tipo de interação. Na primeira, evidencia-se a ideia de que são necessárias moléculas polares, na qual estão presentes dipolos elétricos, para a ocorrência das interações dipolo-dipolo. Na segunda, a relação conceitual complementa essa ideia ao ressaltar o aspecto da intensidade, afirmando que se trata de uma interação mais fraca do que aquelas que envolvem íons, e que cai mais rapidamente com a distância. É de se esperar esse comportamento, uma vez que nas moléculas polares as cargas elétricas dos dipolos são parciais e, dessa forma, a distância entre elas para que se estabeleça uma interação atrativa deve ser menor em comparação com as interações que envolvem íons.

O próximo tópico, “Forças de London”, apresenta relações conceituais que resumem as ideias estudadas com relação a esse tipo de interação. Evidencia-se a universalidade das forças de London ao afirmar que estão presentes em todos os tipos de moléculas, e que a principal característica é a formação de dipolos elétricos instantâneos nas moléculas vizinhas. Complementando essa ideia, afirma-se que a intensidade aumenta com o número de elétrons, deixando implícito que a propriedade molecular da polarizabilidade é o conceito principal nas forças de London. Por fim, as outras características apresentadas para esse tipo de interação e que ficam evidentes pelas relações conceituais são o fato de elas superarem as interações dipolo-dipolo, indicando haver um efeito cumulativo, e o fato de que a polarizabilidade também influencia nas interações entre moléculas apolares e moléculas polares.

No último tópico, “Ligação hidrogênio”, a relação conceitual destaca apenas as espécies que supostamente favorecem a ocorrência da interação, e o fato de que é o tipo mais forte das interações intermoleculares. Neste caso, o texto se preocupa em descrever de forma mais específica quando ocorre este tipo de interação. Conceitos como o de eletronegatividade e de par de elétrons isolado compõem tal definição.

Um outro princípio pode ainda ser extraído do texto trata-se da ideia de que todas as interações são de natureza eletrostática e suas energias decaem, com maior ou menor grau, ou seja, dependem exponencialmente da distância, r , entre as

moléculas. Tal princípio fica evidente observando as equações de 7 a 10, que têm a seguinte fórmula geral:

$$E_p \propto \frac{A_1 A_2}{r^n} \quad (12)$$

em que A_1 e A_2 se referem à carga elétrica (q), no caso de um íon, ou ao momento de dipolo molecular (μ), no caso de uma molécula polar, ou à polarizabilidade (α), no caso de moléculas polares e apolares.

5.2 Definição dos conceitos do texto

Como já foi apresentado, enquanto os princípios são conceitos muito gerais, que estruturam a rede de significados e estabelecem as relações entre os conceitos, estes constituem a própria rede. Em um texto, os conceitos geralmente são identificados como substantivos ou definições, cujos significados só fazem sentido na relação com os demais conceitos.

A etapa seguinte da análise consistiu em determinar os conceitos do capítulo relacionados às interações intermoleculares. Optou-se por realizar uma análise textual, um tipo específico de análise de dados, também chamada de análise lexical (CAMARGO; JUSTO, 2013), a qual possibilita a quantificação e o emprego de cálculos estatísticos em textos (LAHLOU, 1994). Para isso, foi utilizado o software de análise textual Iramuteq¹⁰ (acrônimo de *Interface de R pour les Analyses Multidimensionnelles de Textes et de Questionnaires*). Trata-se de um software gratuito e com fonte aberta, desenvolvido pelo professor do Departamento de Ciências da Educação e da Formação (Département des sciences de l'éducation et de la formation), da Universidade de Toulouse 2, Pierre Ratinaud (LAHLOU, 2012; RATINAUD; MARCHAND, 2012), e licenciado por GNU GPL (v2), um sistema operacional software livre (CAMARGO; JUSTO, 2013). O Iramuteq permite fazer análises estatísticas de textos e ancora-se no software R¹¹ e na linguagem Python¹².

¹⁰ Mais informações disponíveis em: <<http://www.iramuteq.org>>. Acesso em: dez. 2019.

¹¹ Mais informações disponíveis em: <<https://www.r-project.org>>. Acesso em: dez. 2019.

¹² Mais informações disponíveis em: <<https://www.python.org>>. Acesso em: dez. 2019.

Na análise lexical clássica é possível identificar a quantidade de palavras no texto, a frequência média e o número de *hapax* (palavras com frequência igual a 1). O software permite o recurso da lematização¹³ para reduzir as palavras às suas raízes, e identifica as formas ativas e suplementares no texto (CAMARGO; JUSTO, 2013), ou seja, as palavras que constituem a estrutura conceitual e aquelas que não fazem parte, respectivamente.

5.2.1 Preparação do texto

Antes da análise, o texto precisou ser preparado de modo que pudesse ser reconhecido e operado no Iramuteq. Esse processo incluiu uma sequência de passos que foram executados até a obtenção do texto final (ver APÊNDICE A). Neste momento, é importante ressaltar que algumas expressões e termos do texto original foram modificadas, dependendo do contexto. Porém, procurou-se fazer essas modificações com bastante critério e apenas quando necessário, sempre considerando o contexto e tomando cuidado para não alterar o sentido das frases.

Inicialmente o texto foi digitalizado e o arquivo foi salvo em formato PDF¹⁴ e convertido para o formato RTF¹⁵ por um software em OCR¹⁶. Após a conversão, fez-se um cotejo do texto digitalizado com o arquivo original, corrigindo eventuais trechos que não foram reconhecidos. As legendas de figuras, que devem trazer informações e relações conceituais importantes, foram incluídas e consideradas na análise.

Por se tratar de um manual didático de Química, além das legendas, há expressões matemáticas, equações e tabelas que não são reconhecidas no processo de conversão, mas que trazem informações importantes. Nesses casos, a estratégia

¹³ Lematização. *sf.* Processo linguístico que consiste em reduzir uma palavra flexionada à sua parte essencial. Fonte: Dicionário Brasileiro da Língua Portuguesa. Disponível em: <<http://michaelis.uol.com.br/busca?id=5Bbdk>>. Acesso em: dez. 2019.

¹⁴ PDF (sigla em inglês para *Portable Document Format*) é um formato de arquivo usado para exibir e compartilhar documentos de maneira compatível, independentemente do software, do *hardware* ou do sistema operacional. Mais informações disponíveis em: <<https://acrobat.adobe.com/br/pt/acrobat/about-adobe-pdf.html>>. Acesso em: dez. 2019.

¹⁵ RTF (sigla em inglês para *Rich Text Format*) é um formato usado para trocar arquivos de texto entre diversas plataformas e em qualquer sistema operacional, com a desvantagem de não suportar tabelas, imagens ou outros objetos, apenas textos. Mais informações disponíveis em: <<https://br.ccm.net/contents/854-arquivo-rtf>>. Acesso em: dez. 2019.

¹⁶ OCR (sigla em inglês para *Optical Character Recognition*) é uma tecnologia que converte arquivos de imagens em conteúdos editáveis de texto. Mais informações disponíveis em: <<https://pt.linkedin.com/pulse/entenda-o-que-%C3%A9-tecnologia-ocr-e-como-ela-pode-ajudar-caroline>>. Acesso em: dez. 2019.

utilizada foi traduzir essas informações na forma de texto. A tabela da Figura 14, por exemplo, foi transformada em texto seguindo a sequência de leitura das informações, sendo reproduzida da seguinte maneira:

Tabela 5_1 Forças_interiônicas e forças_intermoleculares¹⁷.

A interação total experimentada por uma espécie é a soma de todas as interações das quais ela participa.

Tipo de interação: íon_íon; energia típica: 250 kJ/mol; espécies que interagem: somente íons.

Tipo de interação: íon_dipolo; energia típica: 15 kJ/mol; espécies que interagem: íons e moléculas polares.

Tipo de interação: dipolo_dipolo; energia típica: 2 kJ/mol; espécies que interagem: moléculas polares estacionárias.

Tipo de interação: dipolo_dipolo; energia típica: 0,3 kJ/mol; espécies que interagem: moléculas polares em rotação.

Tipo de interação: dipolo_dipolo_induzido; energia típica: 2 kJ/mol; espécies que interagem: pelo menos uma molécula deve ser polar.

Tipo de interação: London (dispersão), também conhecido como interação dipolo_induzido_dipolo_induzido; energia típica: 2kJ/mol; espécies que interagem: todos os tipos de moléculas.

Tipo de interação: ligação_hidrogênio; energia típica: 20 kJ/mol; espécies que interagem: moléculas que contêm nitrogênio, oxigênio, flúor; a ligação é um hidrogênio compartilhado.

A equação (6), apresentada na página 51, é outro exemplo de elemento que foi transcrito na forma de texto para que pudesse ser analisado. Nesse caso, transcreveu-se a informação contida na equação da seguinte maneira:

A energia_potencial é igual ao produto entre as cargas_elétricas q_1 e q_2 dividido pelo produto entre uma constante e a distância r que separa essas cargas_elétricas.

A transcrição foi feita utilizando o programa bloco de notas pela facilidade de exportação para o formato TXT¹⁸ e codificação UTF-8¹⁹.

Após a preparação, fez-se uma análise estatística das palavras do texto com o objetivo de identificar os conceitos presentes. Definiram-se como critérios a frequência, f , assumindo que os conceitos mais importantes apresentam frequência alta, e o contexto, uma vez que os conceitos devem contribuir para a compreensão das interações intermoleculares. O texto foi rodado no Iramuteq e foram selecionados como formas ativas as seguintes classes de palavras²⁰: adjetivos (adj), substantivos (nom), verbos (ver), advérbios (adv) e formas não reconhecidas (nr), sendo que esta

¹⁷ O uso de algumas palavras ou expressões na forma composta hifenizada é um recurso exigido pelo software utilizado nas análises.

¹⁸ TXT é um formato de texto simples que pode ser criado, aberto e editado utilizando diversos softwares e diferentes sistemas operacionais. Mais informações disponíveis em: <<https://www.reviversoft.com/pt/file-extensions/txt>>. Acesso em: dez. 2019.

¹⁹ UTF-8 (8-bit Unicode Transformation Format) uma codificação binária. Mais informações disponíveis em: <<https://www.ime.usp.br/~pf/algoritmos/aulas/unicode.html>>. Acesso em: dez. 2019.

²⁰ Entre parênteses são representadas abreviações das classes de palavras, em francês, disponíveis no Iramuteq. A saber: adj = *adjectif*; nom = *nom*; ver = *verbe*; adv = *adverbe*; nr = *non reconnue*.

última compreende, por exemplo, expressões hifenizadas ou termos que não se encaixam nas demais classes de palavras, mas que, porventura, venham a ser importantes. Foram selecionadas estas classes pelo fato de virem já previamente selecionadas como formas ativas pelo software. As demais classes foram selecionadas como formas suplementares.

O resultado dessa primeira análise trouxe como formas ativas muitas palavras que, embora tenham alta frequência, não são relevantes para a compreensão do texto. Por exemplo, as palavras “mais” ($f = 38$), “pequeno” ($f = 20$) e “interagir” ($f = 15$) não apresentam valor informacional e, por esse motivo podem ser descartadas. Essa pré-seleção foi feita para todas as formas ativas e percebeu-se que a classe de verbos, de advérbios e de adjetivos não tinha nenhuma informação relevante para o tema e foram excluídos das formas ativas, havendo a necessidade de rever a seleção das classes de palavras.

Desta vez, foram mantidas as classes dos substantivos e as formas não reconhecidas. O texto foi novamente rodado no Iramuteq com estes novos parâmetros e procedeu-se nova análise estatística, na qual foram obtidas um total de 6.956 palavras. Desse total, 537 palavras correspondem às formas ativas selecionadas e 529 são *hapax*. A etapa seguinte consistiu em avaliar da lista *hapax* se havia alguma palavra que fosse importante para a compreensão do tema, mas que ocorreu apenas uma vez no texto. Para isso, analisou-se o contexto em que cada uma estava e foram selecionadas as seguintes palavras (conceitos) classificadas como formas não reconhecidas: “densidade_de_elétrons”, presentes no contexto das forças de London e importantes para a compreensão do conceito de polarizabilidade; “dipolo_induzido_dipolo_induzido”, outro nome para as forças de London, mas que descreve um aspecto fundamental para a ocorrência dessa interação, que é a formação de dipolos induzidos em moléculas apolares; “forças_interiônicas”, que são as forças presentes nas interações íon-íon; “forças_intramoleculares”, que são as forças responsáveis por manter os átomos coesos em uma molécula; e “interações_intermoleculares”, que generaliza todos os tipos de interação entre as moléculas, e que é usado como sinônimo de forças intermoleculares em diferentes contextos.

Analisando a lista de formas ativas, chamou atenção a palavra “interiônica”, presente no contexto das interações interiônicas. Optou-se por manter ambas conjugadas na expressão “interações_interiônicas”, já que não fazia sentido, pelo contexto, estarem separadas. A palavra “interação” apresentou frequência igual a 81,

sendo que destas, 42 ocorrências foram na forma “interações” e 39, na forma “interação”. Provavelmente, a maior parte das ocorrências está associada ao contexto dos tipos de interação (por exemplo, interações dipolo-dipolo). No entanto, essas palavras não estavam conjugadas, e verificou-se também outras formas ativas que poderiam gerar dúvidas quanto a serem selecionadas ou não, como “forças_de_london”, “forças_de_atração”, “forças_de_repulsão”, dentre outras.

A princípio foram mantidas “forças_de_london” ($f = 23$), devido à alta frequência no texto e “dipolo_induzido_dipolo_induzido” ($f = 1$), pois ambas se referem ao mesmo conceito, embora tenham sido usadas distintamente. A palavra “london” ($f = 4$), quando relacionada ao cientista Fritz London foi excluída. No entanto, quando relacionada ao contexto das interações intermoleculares, foi substituída por “forças_de_london”. Por sua vez, “dispersão” ($f = 2$) foi mantida e “interação” e “intermolecular”, quando presentes no mesmo contexto, foram condensadas para “interação_intermolecular” aumentando, assim, a frequência desse conceito de 7 para 8. Dessa forma, obteve-se tanto “forças_intermoleculares” ($f = 20$) quanto “interações_intermoleculares” ($f = 8$), que foram mantidos separadamente, com a possibilidade de serem retirados da estrutura da rede, caso seja conveniente. Com as modificações feitas, houve diminuição da frequência de “interação”.

A análise da palavra “força” ($f = 18$) mostrou a ocorrência nos seguintes contextos: apenas “força” ($f = 11$), “força_dipolo_dipolo” ($f = 2$), “força_íon_dipolo” ($f = 1$), “força_entre_íons”, o mesmo que “forças_interiônicas” ($f = 2$), e “forças entre as moléculas”, o mesmo que “forças_intermoleculares” ($f = 2$). Dessa forma, optou-se por manter todas separadas, ressaltando os diferentes tipos de interação intermolecular, além do próprio conceito geral de força.

Analizando a lista de formas suplementares, percebeu-se alguns adjetivos importantes para a compreensão do tema, mesmo eles apresentando frequência baixa em alguns casos. Por exemplo, “apolar” ($f = 10$) está presente no contexto de compostos apolares, moléculas apolares, além de outros. Associado ao momento de dipolo, tem-se “induzido” ($f = 1$), no contexto das interações do tipo forças de London, nas quais há formação de dipolos elétricos induzidos pelos dipolos elétricos instantâneos em razão da polarizabilidade das moléculas. As ocorrências de “momento_de_dipolo” ($f = 23$), portanto, são importantes. Há ocorrência em três contextos distintos, “momento_de_dipolo” ($f = 16$), “momento_de_dipolo_induzido” ($f = 1$) e “momento_de_dipolo_instantâneo” ($f = 6$). Isso implica duas opções: 1) separar os

diferentes tipos de momento de dipolo, ou 2) manter apenas “momento_de_dipolo”. Optou-se pela segunda alternativa. Da mesma forma, para o termo “instantâneo” ($f = 13$), relacionado com momento de dipolo e carga parcial, optou-se por mantê-lo, pois entende-se que seu contexto é importante para a compreensão do tema. O termo “polarizável” ($f = 2$) está relacionado às moléculas e entende-se que é um conceito importante para a compreensão das interações intermoleculares, mais especificamente das forças de London e, por esse motivo, optou-se por mantê-lo.

Essas análises confirmaram a importância de alguns adjetivos, que devem, portanto, compor a estrutura conceitual do texto. São eles: “apolar” ($f = 10$), “instantâneo” ($f = 13$) e “polarizável” ($f = 2$). Além desses, foram selecionados também “polar” ($f = 30$), “líquido” ($f = 77$) e “sólido” ($f = 25$), pois todos têm alta frequência no texto e estão presentes em contextos importantes para a compreensão do tema.

O texto foi novamente modificado com base nas análises descritas até este momento, e foi novamente rodado no Iramuteq, para nova análise estatística. Desta vez, as formas ativas selecionadas foram os substantivos, os adjetivos, e as formas não reconhecidas.

Da lista *hapax* foram selecionados os seguintes termos, devido à importância deles para a compreensão do tema: “densidade_de_elétrons”, “dipolo_induzido_dipolo_induzido”, “fases_condensadas”, “forças_de_repulsão”, “forças_intramoleculares”, “ligação_metálica”, “ligações_iônicas” e “partícula”. Na lista de formas ativas, pelo mesmo critério, foram selecionados os seguintes termos: “dispersão” ($f = 2$), “eletronegatividade” ($f = 2$), “energia_cinética” ($f = 2$), “forças_interiônicas” ($f = 2$), “interações_coulômbicas” ($f = 2$), “íon_íon” ($f = 2$), “massa_molar” ($f = 2$), “polarizável” ($f = 2$), “repulsão” ($f = 2$) e “volume” ($f = 2$).

Analisando os adjetivos da lista de formas ativas, o termo “intermolecular” ($f = 5$), que não havia sido escolhido, tem duas ocorrências relacionadas à interação intermolecular, cuja expressão não havia sido conjugada. As modificações necessárias foram feitas e esse termo foi selecionado na lista de formas ativas, aumentando a frequência do conceito “interações_intermoleculares”.

Analisando os substantivos, foram selecionados os seguintes termos, além daqueles que já haviam sido escolhidos: “água” ($f = 50$), que é a substância mais citada no texto; “orientação” ($f = 4$), relacionado à orientação das moléculas no espaço e do momento de dipolo, aspectos que influenciam na força das interações; “hidrogênio” ($f = 25$) e “oxigênio” ($f = 13$), os quais têm frequência alta e são muito importantes no contexto

da ligação de hidrogênio; “r” ($f = 11$) e “distância” ($f = 23$), que significam a mesma coisa e sempre ocorrem juntos – nesse caso, para evitar redundância, optou-se pelo termo “distância”.

5.2.2 Definição das categorias de conceitos

Obteve-se uma lista final com 66 conceitos selecionados do texto. A Figura 23, a seguir, apresenta uma nuvem de palavras com esses conceitos, na qual o tamanho das palavras é proporcional à frequência no texto.

Figura 23 – Nuvem de palavras com os 66 conceitos selecionados do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). O tamanho das palavras é proporcional à frequência (Iramuteq 0.7 alpha 2)

influenciam essas interações e, conseqüentemente, as propriedades físicas da matéria;

2. Estado físico: compreende os conceitos que descrevem os diferentes estados de agregação das partículas que constituem as substâncias. Esses conceitos se relacionam com as interações intermoleculares, ou seja, as diferentes fases da matéria são uma consequência dessas interações;
3. Tipos de interação: descrevem os diferentes tipos de interação existentes no capítulo. São apresentadas as características de cada tipo, as partículas envolvidas e como eles influenciam nas propriedades físicas das substâncias, por exemplo, na temperatura de ebulição e na solubilidade em água;
4. Partícula: compreende os conceitos que descrevem os tipos de partícula que influenciam cada tipo de interação;
5. Propriedade física: descreve, de maneira geral, as propriedades da matéria, mostrando como cada tipo de interação tem influência sobre as propriedades macroscópicas;
6. Propriedade molecular: descreve as propriedades atômicas e moleculares que influenciam as interações intermoleculares. Analisando os conceitos que formam essa categoria e o contexto em que cada um ocorre, é possível perceber quais propriedades são mais importantes em cada tipo de interação;
7. Substância: compreende conceitos que descrevem as substâncias mais citadas no texto e, conseqüentemente, as mais importantes relacionadas ao tema;
8. Conceitos básicos: compreende conceitos fundamentais da ciência. Eles são importantes para o estudo das interações intermoleculares, mas são conceitos mais gerais, no sentido de que estão presentes também em outras áreas de estudo da Química, como também da Física e da Biologia.

Ao definirem-se as categorias de conceitos, estes puderem ser agrupados de modo a facilitar a organização e a análise. O Quadro 4 apresenta a lista dos conceitos extraídos do texto, definidos como sendo os mais importantes para a compreensão do tema interações intermoleculares.

Quadro 4 – Lista dos 66 conceitos organizados pelas categorias

Estrutura molecular	Estado físico	Tipos de interação	Partícula
Molécula ($f = 158$)	Gás ($f = 29$)	Interação ($f = 70$)	Átomo ($f = 33$)
Arranjo ($f = 7$)	Líquido ($f = 23$)	Forças de London ($f = 25$)	Íon ($f = 30$)
Estrutura ($f = 7$)	Sólido ($f = 21$)	Ligação hidrogênio ($f = 24$)	Elétron ($f = 17$)
Orientação ($f = 4$)	Fase ($f = 17$)	Dipolo-dipolo ($f = 16$)	Cátion ($f = 9$)
Geometria ($f = 3$)	Vapor ($f = 5$)	Força ($f = 13$)	Par de elétrons ($f = 4$)
	Estado físico ($f = 3$)	Forças intermoleculares ($f = 10$)	Ânion ($f = 3$)
	Fases condensadas ($f = 1$)	Íon-dipolo ($f = 9$)	
		Hidratação ($f = 6$)	
		Interações intermoleculares ($f = 6$)	
		Dipolo-dipolo induzido ($f = 5$)	
		Forças de atração ($f = 4$)	
		Forças interiônicas ($f = 2$)	
		Interações coulômbicas ($f = 2$)	
		Íon-íon ($f = 2$)	

(Continua)

(Continuação)

Propriedade física	Propriedade molecular	Substância	Conceitos básicos
Ponto de ebulição ($f = 49$)	Carga parcial ($f = 30$)	Substância ($f = 35$)	Energia ($f = 27$)
Ponto de fusão ($f = 29$)	Polar ($f = 30$)	Água ($f = 27$)	Energia potencial ($f = 24$)
Propriedades físicas ($f = 13$)	Momento de dipolo ($f = 23$)	Hidrogênio ($f = 25$)	Distância ($f = 22$)
	Dipolo ($f = 11$)	Oxigênio ($f = 13$)	Carga elétrica ($f = 14$)
	Apolar ($f = 9$)	Solvente ($f = 3$)	Atração ($f = 13$)
	Polarizabilidade ($f = 5$)		Ligação ($f = 13$)
	Propriedades moleculares ($f = 5$)		Rotação ($f = 10$)
	Distribuição eletrônica ($f = 4$)		Matéria ($f = 8$)
	Nuvem de elétrons ($f = 4$)		Modelo ($f = 6$)
	Polaridade ($f = 4$)		Temperatura ($f = 4$)
	Propriedades atômicas ($f = 3$)		Material ($f = 2$)
	Eletronegatividade ($f = 2$)		Repulsão ($f = 2$)
	Polarizável ($f = 2$)		
	Densidade de elétrons ($f = 1$)		

(Conclusão)

Fonte: autoria própria (2020).

5.3 Identificação dos dados do texto

Retomando as ideias de Pozo e Crespo, os autores definem dados ou fatos como “uma informação que afirma ou declara algo sobre o mundo” (POZO; CRESPO, 2009, p. 78). No entanto, a identificação de um dado em um texto pode não ser uma tarefa trivial. Durante a leitura do capítulo, em diversos momentos surgiram dúvidas sobre se uma informação apresentada era um dado/fato ou se se tratava de uma relação conceitual. Nesse contexto, apoiando-se no referencial apresentado, definiu-se que as informações factuais serviriam de suporte para ilustrar os conceitos e os princípios do texto, apresentando exemplos que descrevem determinada situação sobre um fenômeno estudado, ou de dados empíricos que traduzem uma propriedade.

No tópico “Formação de fases condensadas”, ao definir o conceito de fase, os autores afirmam que há substâncias com mais de uma fase sólida, nas quais os átomos e moléculas que as constituem assumem arranjos diferentes. Para ilustrar essa informação, eles citam como exemplo duas formas alotrópicas do carbono – diamante e grafite –, ambas sólidas e que se diferem pela organização dos átomos de carbono na estrutura. Essa diferença de organização da estrutura é responsável pelas propriedades distintas dos dois compostos. Seguindo o texto, na tabela já apresentada na Figura 14, os valores de energia típica são dados que mostram a magnitude dos tipos de interação intermolecular, permitindo compará-las. Por exemplo, enquanto a energia típica de uma interação íon-íon é da ordem de 250 kJ mol^{-1} , a energia típica da ligação de hidrogênio é da ordem de 20 kJ mol^{-1} , 12,5 vezes menor. No entanto, essa é a mais forte das interações intermoleculares, apresentando energia 10 vezes maior que as interações que envolvem dipolos elétricos, como as forças de London, cujos valores típicos de energia são da ordem de 2 kJ mol^{-1} .

Em “Forças íon-dipolo”, os autores definem o fenômeno da hidratação por meio do exemplo de um íon solvatado em água. Ainda sobre a hidratação, é sabido que alguns sais podem formar hidratos no processo de recristalização. Nesse sentido, os autores exemplificam os hidratos citando o carbonato de sódio, $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{ H}_2\text{O}$, e o sulfato de cobre, $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{ H}_2\text{O}$. Por meio deles, evidencia-se que alguns íons formam hidratos com mais moléculas de água e outros com menos, dependendo do tamanho e da carga elétrica do íon. Para ilustrar esse fato, são apresentados exemplos que comparam essas duas propriedades: ao afirmar que os cátions lítio e sódio, por serem

menores, normalmente formam sais hidratados, enquanto os cátions potássio, rubídio e cério, por serem maiores, formam sais anidros, assim como os sais de amônio. Dando suporte a essa informação, o texto apresenta os dados de raio atômico do íon amônio, NH_4^+ , 143 pm, e do íon rubídio, Rb^+ , 149 pm. Ou seja, por terem tamanhos semelhantes, é razoável afirmar que apresentam comportamento semelhante com relação à hidratação. Por fim, para ilustrar o efeito da carga elétrica na extensão da hidratação, são apresentados dados sobre os cátions bário, Ba^{2+} , e potássio, K^+ , que apresentam raios semelhantes (136 pm e 138 pm, respectivamente). No entanto, como o cátion bário tem duas vezes mais carga que o cátion potássio, ele é capaz de formar sais hidratados, como o $\text{BaCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$, enquanto o cátion potássio não. Outro exemplo que reforça a influência da carga é o do cátion lantânio, La^{3+} . Embora tenha raio menor (122 pm), a carga maior permite a formação de sais mais hidratados ainda, como o $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ e o $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 9 \text{H}_2\text{O}$.

No tópico “Forças dipolo-dipolo”, para ilustrar esse tipo de interação é utilizado como exemplo a molécula polar do clorometano, CH_3Cl (Figura 24).

Figura 24 – Representação da molécula de clorometano com o mapa de potencial eletrostático

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 271).

Por conta da diferença de eletronegatividade entre os átomos de carbono e de cloro, forma-se uma região de densidade de carga negativa ao redor do cloro (vermelho) e uma região de densidade de carga positiva ao redor do grupo $-\text{CH}_3$, formando um dipolo elétrico. Para explicar o efeito da rotação na energia potencial da interação dipolo-dipolo, o texto apresenta o mesmo exemplo da molécula de

clorometano, mas agora considerando-a na fase gasosa, na qual não haveria interação desta com outras moléculas. Por fim, os exercícios apresentados ao final do tópico trazem exemplos de moléculas e dados de temperatura de ebulição das substâncias para ilustrar as diferenças existentes para esse tipo de interação intermolecular. Ao apresentar a temperatura de ebulição do *p*-diclorobenzeno igual a 174 °C, e do *o*-diclorobenzeno, igual a 180 °C, é possível explicar essa diferença com base nas fórmulas estruturais das duas moléculas (Figura 25).

Figura 25 – Fórmulas estruturais do *p*-diclorobenzeno (à esquerda) e do *o*-diclorobenzeno (à direita)

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 272).

Ao analisar as duas fórmulas estruturais, percebe-se que no *p*-diclorobenzeno as posições das ligações polares C—Cl são opostas e, portanto, apresentam momento de dipolo elétrico resultando nulo. Dessa forma, a temperatura de ebulição será menor, pois as moléculas interagem com menos intensidade. Na molécula do *o*-diclorobenzeno, o momento de dipolo elétrico não é nulo e, portanto, forma-se um dipolo elétrico que aumenta a intensidade da interação entre as moléculas e, consequentemente, a temperatura de ebulição da substância.

No tópico “Forças de London” o primeiro fato apresentado ilustra a existência de interações atrativas entre átomos e moléculas: os gases nobres podem ser liquefeitos e os hidrocarbonetos que constituem a gasolina, e que são moléculas apolares, são líquidos. Outro dado que exemplifica a ocorrência das forças de London nas substâncias é apresentado na Figura 26, ao comparar os estados físicos de três hidrocarbonetos: pentano, pentadecano e octadecano.

Figura 26 – Foto que mostra os estados físicos de três hidrocarbonetos, como forma de diferenciar a intensidade das forças de London em função do tamanho da molécula. À esquerda, o pentano (C_5H_{12}) é um líquido móvel; ao centro, o pentadecano ($C_{15}H_{32}$) é um líquido viscoso; à direita, o octadecano ($C_{18}H_{38}$) é um sólido

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 273).

O exemplo da foto ilustra bem a diferença na intensidade das forças de London, que pode ser explicada pelo tamanho das moléculas. No pentano, como as moléculas são menores, há menos pontos de contato entre elas para interagir. Essas regiões de contato vão aumentando até o octadecano; nele, como as moléculas são grandes, podem interagir com mais intensidade, sendo necessário fornecer mais energia para romper essas interações. Dessa forma, o octadecano é sólido, enquanto o pentano é líquido. Mais adiante, o texto traz uma tabela com dados de temperaturas de fusão e de ebulição de diversas substâncias, mostrando como as propriedades das substâncias variam em função das forças de London. O efeito da forma das moléculas é ilustrado com os exemplos das moléculas de pentano e de 2,2-dimetilpropano, isômeros, cujas temperaturas de ebulição são 10 °C e 36 °C, respectivamente (Figura 27).

Figura 27 – Representação tridimensional para as moléculas de pentano e 2,2-dimetilpropano

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 274).

As duas estruturas representam isômeros de fórmula química C_5H_{12} , cujas geometrias das moléculas influenciam na intensidade das forças de London que atuam em cada composto. Enquanto o pentano é uma molécula mais linear, com mais regiões de contato, a intensidade das interações será maior do que no caso do 2,2-dimetilpropano que, por ser mais esférica, apresenta menos regiões de contato. Por fim, os exemplos dos halogenetos de hidrogênio no exercício resolvido procuram ilustrar as diferenças nas temperaturas de ebulição em função da intensidade das forças de London nas moléculas das seguintes substâncias: HCl ($-85\text{ }^{\circ}\text{C}$), HBr (-67°C) e HI ($-35\text{ }^{\circ}\text{C}$). Esse exemplo é interessante também, pois mostra que as forças de London predominam sobre as interações dipolo-dipolo, uma vez que pelas diferenças de eletronegatividade as temperaturas de ebulição deveriam diminuir do HCl para o HI. No entanto, observa-se o comportamento contrário, que pode ser explicado pelo fato de que o iodo, por ser maior, é mais polarizável que os demais halogênios e, dessa forma, é capaz de interagir mais fortemente pelos dipolos instantâneos formados.

No último tópico, “Ligação hidrogênio”, apresenta-se o exemplo das temperaturas de ebulição de compostos binários dos elementos químicos dos grupos 14 a 17 (Figura 28).

Figura 28 – Gráfico da variação da temperatura de ebulição de hidretos moleculares em função dos ânions e da localização na tabela periódica

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 276).

Os valores de temperatura de ebulição mais altos para a água (H₂O), fluoreto de hidrogênio (HF) e amônia (NH₃) sugerem que nesses compostos as interações intermoleculares são mais fortes do que nos demais compostos de cada grupo, cujos valores de temperatura de ebulição aumentam de cima para baixo, com o aumento do número de elétrons. Para explicar como ocorrem as ligações de hidrogênio, o texto apresenta como exemplo duas moléculas de água em aproximação e mostra os dados do comprimento da ligação O—H (101 pm) e da interação do tipo ligação de hidrogênio H···O no gelo (175 pm). O texto afirma que a ligação de hidrogênio se sobressai às demais, tem cerca de 10% da energia de uma ligação covalente, sendo difícil rompê-la, e ocorre até mesmo no vapor de substâncias, como do fluoreto de hidrogênio, que forma vapores de (HF)₆, e do ácido acético, que contém dímeros (Figura 29).

Figura 29 – Representação tridimensional das moléculas de HF (à esquerda) e de ácido acético (à direita). As ligações de hidrogênio que mantêm as moléculas unidas estão representadas pelas linhas tracejadas

Fonte: Atkins e Jones (2012, p. 276).

Esses dois são exemplos de como as ligações de hidrogênio são fortes, existindo até mesmo nos vapores de substâncias.

De maneira geral, pode-se concluir que, dentre as propriedades físicas das substâncias, a que melhor ilustra as intensidades dos diferentes tipos de forças intermoleculares é a temperatura de ebulição. Ou seja, os valores de temperatura de ebulição e o estado de agregação das partículas nas substâncias, quando comparados a uma mesma temperatura, constituem verdadeiros fatos ou dados que auxiliam na diferenciação dos diferentes tipos de interação e, conseqüentemente, na compreensão conceitual do tema.

O Quadro 5, a seguir, traz uma síntese dos fatos identificados no texto os tipos de interação intermolecular.

Quadro 5 – Fatos e dados que exemplificam os conceitos do texto do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012)

Tópico	Tipo de interação intermolecular	Exemplos identificados no texto
Formação de fases condensadas	Todos	Os valores de energia típica em, kJ mol^{-1} , e a definição das espécies químicas ilustram as características de cada tipo de interação.
Forças íon-dipolo	Forças íon-dipolo	O fenômeno da hidratação de íons e a presença de água de hidratação em alguns sólidos iônicos ilustram as interações do tipo íon-dipolo.
Forças dipolo-dipolo	Forças dipolo-dipolo	As fórmulas estruturais de moléculas e os valores de temperatura de ebulição ilustram a formação de dipolos elétricos e a influência das forças dipolo-dipolo nas propriedades físicas.

(Continua)

(Continuação)

Tópico	Tipo de interação intermolecular	Exemplos identificados no texto
Forças de London	Forças de London	Os valores de temperatura de fusão e de ebulição para diferentes moléculas, polares e apolares, ilustram as diferenças de intensidade das forças de London, devido ao número de elétrons presentes.
Ligação hidrogênio	Ligação de hidrogênio	O gráfico da variação de temperatura de ebulição ilustra a intensidade das ligações de hidrogênio em comparação com outros tipos de interação.

(Conclusão)

Fonte: autoria própria (2020).

5.4 Considerações sobre os conteúdos conceituais no texto

As ideias principais do que é estudado em cada tópico ficam evidentes por meio das análises das relações conceituais presentes em cada síntese, considerando o conhecimento químico sobre o assunto. No entanto, alguns aspectos importantes não estão explícitos, ou totalmente explícitos. Nesses casos, a leitura minuciosa do tópico pode auxiliar na identificação dessas características. Essa poderia ser uma crítica levantada sobre o texto: a necessidade de repensar como tornar explícitos os aspectos principais de cada tópico. Um questionamento que fica nesta etapa é se a obtenção da estrutura conceitual é capaz de evidenciar explicitamente os aspectos considerados fundamentais para a compreensão dos tipos de interação intermolecular, alinhando-se com a definição de Pozo e Crespo (2009) de que os princípios conceituais estruturam a rede de significados por estarem presentes em todos os conteúdos relacionados ao tema, embora não sejam explícitos.

Os fatos no texto foram apresentados como dados empíricos ou exemplos, cujos principais objetivos são ilustrar um fenômeno ou comparar propriedades, como a temperatura de ebulição, presente na maioria dos casos. O uso da temperatura de ebulição como exemplo de dado se justifica nesse contexto, pois é uma propriedade física que é influenciada diretamente pelas interações intermoleculares.

Percebe-se que todos os fatos podem ser explicados pelas propriedades atômico-moleculares, como o momento de dipolo, carga elétrica, raio, polaridade e

polarizabilidade. Isso ressalta a importância dessas propriedades como conceitos centrais para a compreensão das interações intermoleculares. Dessa forma, pode-se assumir que as propriedades moleculares devem compor a estrutura do conhecimento sobre as interações intermoleculares presentes no capítulo.

Confirmou-se que, embora Pozo e Crespo (2009) apresentem uma definição de fatos, identificá-los no texto não foi uma tarefa trivial. A busca por exemplos, dados empíricos e informações que ilustram de forma específica um fenômeno ou uma propriedade, dando suporte a informações conceituais, mostrou que fatos e conceitos estão muito relacionados enquanto conteúdos conceituais e que os fatos só apresentam um sentido no texto quando analisados sob a perspectiva de conceitos específicos, reforçando as ideias apresentadas pelos autores.

A estrutura conceitual é formada por conceitos, logo os fatos e dados não fazem parte dela, mas pode-se refletir sobre como essas informações estão ancoradas aos conceitos.

A definição dos conceitos é um processo bastante exaustivo e que exige muitas releituras do texto, analisando os diferentes contextos com muito cuidado, para garantir que os conceitos destacados contribuam para a compreensão das interações intermoleculares. Nesse sentido, os dois aspectos principais utilizados para selecionar os conceitos foram a frequência no texto aliada ao contexto, pois mesmo alguns conceitos que apresentam frequência baixa foram identificados como importantes para o tema.

A lista final mostra que há muitos conceitos importantes e analisá-los passa a ser um processo complicado. A categorização foi importante na tentativa de facilitar essa análise. Outro aspecto importante que se pode concluir é que, devido ao grande número de conceitos, e de categorias, fica difícil perceber as relações conceituais presentes. Nesse sentido, a obtenção da estrutura conceitual se justifica novamente, pois apresenta de forma gráfica as relações entre os conceitos, permitindo identificar aquelas que são mais importantes.

CAPÍTULO 6

Análise das redes conceituais

A seguir, propõe-se uma maneira de analisar o texto com o objetivo de identificar os conceitos mais importantes dentre aqueles já selecionados nos conteúdos conceituais, e de levantar a estrutura conceitual presente, evidenciando as relações entre esses conceitos no texto. Esse tipo de abordagem na qual são identificadas as relações entre as palavras (conceitos) no texto, é chamada análise de rede textual (STEELS, 2005). As etapas descritas para transformar um texto em uma rede conceitual e poder analisá-lo a partir desse ponto, utilizando métricas da Teoria das Redes Complexas, foram desenvolvidas utilizando como unidade de análise as frases do texto, e o critério de coocorrência dos conceitos. Dessa forma, garante-se que haverá coocorrência entre os conceitos em um mesmo segmento de texto. Há outras formas de definir a unidade de análise. Por exemplo, Yun e Spark (2018) avaliam a coocorrência considerando um intervalo de cinco palavras à esquerda ou à direita da palavra que se deseja analisar, atribuindo pesos diferentes a essas distâncias. Outros autores (PARANYUSHKIN, 2011) também aplicam o critério de pesos relativos para as distâncias entre as palavras em cada unidade de análise. Neste trabalho, no entanto, não se pretendeu comparar diferentes unidades de análise, mas optou-se por identificar as coocorrências entre as palavras considerando como segmento de texto as frases. Essa escolha pela frase, ao invés da separação entre conceitos por um intervalo de palavras, se justifica pois, assim, as coocorrências aparecerão apenas entre os conceitos de uma mesma frase, que são as menores unidades de significado em um texto. Os segmentos de texto poderiam ser parágrafos ou mesmo o texto todo (maior unidade possível); no entanto, nos parágrafos os conceitos se relacionariam por estarem presentes em um mesmo assunto e o número de relações seria muito grande, já que a quantidade de conceitos em um parágrafo é maior que em uma frase. Por sua vez, no texto completo, todos os conceitos se relacionariam entre si, sem distinção e com mesmo peso, o que não permitiria diferenciar os conceitos mais importantes, ou mais centrais, daqueles menos importantes. A opção pelas frases é aquela que está mais próxima de capturar relações semânticas reais entre os conceitos, que permitem transformar uma frase em uma proposição típica de um mapa conceitual.

Além da análise estatística, o Iramuteq oferece análises multivariadas, mais complexas, como a análise de similitude, baseada na Teoria dos grafos, um ramo da Matemática que estuda as relações entre objetos combinatórios, denominados grafos. Segundo Feofiloff, Kohayakawa e Wakabayashi (2001), um grafo, G , é um par (V,A) ,

em que V é um conjunto qualquer e A é um subconjunto de V . Os elementos que compõem V são chamados vértices (ou nós), e os elementos de A são chamados arestas. Por meio da análise de similitude é possível identificar as coocorrências entre as palavras no texto, indicando a conectividade entre elas e auxiliando na identificação da estrutura do texto (MARCHAND; RATINAUD, 2012).

6.1 Análise do texto como rede conceitual

No texto do capítulo analisado, a matriz de coocorrência obtida no Iramuteq é formada pelos 66 conceitos determinados pela análise estatística e de contexto, e mostra as coocorrências entre eles nas frases. Essa matriz foi importada para o Gephi²¹ (BASTIAN; HEYMANN; JACOMY, 2009), um software gratuito e com fonte aberta usado para análise de redes e grafos. O software converte a matriz em uma rede por meio dos seguintes critérios:

- Os conceitos apresentados na matriz de coocorrência são os nós da rede;
- Arestas ligam pares de nós na rede sempre que há coocorrência entre eles, segundo a matriz de adjacência;
- Os pesos das coocorrências são diretamente proporcionais às espessuras das arestas que unem os nós da rede.

O software Gephi foi selecionado para as análises por ser de fácil utilização, por apresentar um modo de visualização de redes renderizadas em tempo real, por permitir a manipulação de redes bastante grandes (acima de 20.000 nós) (BASTIAN; HEYMANN; JACOMY, 2009) e por apresentar diversos recursos de análise das estruturas, desde aspectos gerais, como determinação do número de nós e de arestas, diâmetro, densidade e análise de *clusters*, até aspectos específicos de nós, como análises de centralidade, utilizando métricas específicas, por exemplo as centralidades de grau, de proximidade e intermediação.

A análise das redes foi dividida em três partes: na primeira, obteve-se a estrutura conceitual de um pequeno trecho do texto que corresponde à introdução e ao primeiro tópico, “Formação de fases condensadas”, e fez-se toda a análise das métricas na rede obtida; na segunda, obteve-se a estrutura conceitual do texto completo, como definido no início do trabalho; por fim, na última parte, fez-se uma

²¹ Mais informações disponíveis em: <<https://gephi.org/>>. Acesso em: jan. 2020.

análise da rede completa evidenciando as relações existentes entre os tipos de interação intermolecular. Essa estratégia foi adotada pois, como se trata de um estudo exploratório de análise de redes, a opção de analisar primeiro um trecho menor, com quantidade menor de conceitos, permitiu verificar como as relações conceituais se apresentam e a aplicar as métricas para verificar o significado de cada uma, o que medem, quais são mais relevantes para esse tipo de análise e como se determinam os conceitos mais importantes. A análise no trecho menor mostrou também que a estrutura obtida traduz com bastante exatidão o conteúdo do texto, confirmando que a análise de redes pode servir como um método para análise de textos com foco nas relações conceituais presentes.

Passando para o texto completo, obteve-se a estrutura conceitual com as relações entre os conceitos que descrevem o conhecimento das interações intermoleculares. Por fim, a terceira parte procurou evidenciar como os tipos de interação se relacionam na rede; como o capítulo está organizado por tipos de interação intermolecular, fez-se a tentativa de evidenciar os conceitos comuns e que unificam todos os tipos de interação intermolecular.

Na primeira parte, o texto foi rodado no Iramuteq, selecionando as formas não reconhecidas, substantivos e adjetivos como formas ativas. O resultado obtido para a análise estatística foi:

- Número de ocorrências totais: 1.111 (quantidade total de palavras presentes no trecho analisado);
- Número de formas ativas: 317 (quantidade de palavras presentes que se enquadram como formas não reconhecidas, substantivos e adjetivos, levando em consideração a lematização do texto);
- Número de formas *hapax*: 172 (quantidade de palavras no texto cuja frequência (*f*) é igual a 1). Estas representam:
 - 15,48% das ocorrências totais;
 - 54,26% das formas ativas.

Da lista de 66 conceitos determinados anteriormente, há 39 conceitos presentes neste trecho, e que compõem essa rede conceitual.

6.1.1 Análise da correlação entre as medidas de centralidade

Antes de analisar a estrutura da rede com base nas métricas, foi necessário avaliar se existe alguma relação entre essas medidas. Bolland (1988) mostrou que a centralidade, a proximidade, o grau e o autovetor são correlacionadas, mas que a intermediação não está correlacionada com outras medidas. Outros trabalhos, por sua vez, mostraram que há correlação entre a intermediação e outras métricas (ROTHENBERG et al., 1995; LEE, 2006). Batool e Niazi (2014) mostraram existir alta correlação, por exemplo, entre proximidade e excentricidade, que mede o quanto um nó está distante dos demais, ou mesmo entre grau e autovetor, mas que as correlações delas com a intermediação variam entre as redes. Valente et al. (2008) concluíram que a correlação entre as métricas indica que se trata de medidas distintas, porém conceitualmente relacionadas. Essas inconsistências sugerem que as correlações dependem mais da estrutura das redes do que das próprias definições das centralidades. De fato, as correlações entre a intermediação e outras métricas apresentam variações maiores, sugerindo que as propriedades estruturais da rede afetam fortemente as correlações (SCHOCH et al., 2017).

A correlação é uma análise estatística bivariada cujo objetivo é verificar a associação entre duas variáveis. Os resultados desse tipo de análise sempre se situam entre -1 e $+1$. Quanto mais próximo da unidade, mais forte é a correlação linear entre as variáveis, podendo ser diretamente proporcional (+) ou inversamente proporcional (-); por sua vez, quanto mais próximo de zero, mais fraca é a correlação. O software utilizado foi o PAST (*Paleontological Statistics*)²² (RYAN et al., 1995), que permite realizar diversas análises de correlação, dentre elas, a correlação de Pearson, a de Spearman e a de Kendall. Nesses tipos de análise, é obtida uma matriz com os valores de correlação das variáveis no triângulo inferior e as significâncias, ou seja, as probabilidades de que as correlações obtidas não foram por mero acaso, como indica a hipótese nula (H_0), no triângulo superior. A diagonal principal é vazia, pois traz a relação de uma variável com ela mesma.

O coeficiente de correlação paramétrica mais usado é o r de Pearson, que mede a correlação linear entre duas variáveis. É calculado pela seguinte expressão:

²² Software disponível gratuitamente em: <<https://folk.uio.no/ohammer/past/>>. Acesso em: fev. 2020.

$$r = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}}$$

em que:

r = coeficiente de Pearson, que correlaciona as variáveis x e y .

x_i = i -ésimo valor da variável x .

y_i = i -ésimo valor da variável y .

$\bar{x}$ = média de todos os valores da variável x .

$\bar{y}$ = média de todos os valores da variável y .

A significância, t , é calculada utilizando um teste t bicaudal com $n - 2$ graus de liberdade por meio da seguinte expressão:

$$t = r \sqrt{\frac{n - 2}{1 - r^2}}$$

O coeficiente de correlação ordinal não-paramétrico de Spearman leva em consideração a ordenação dos valores das variáveis. É calculado pela seguinte expressão:

$$r_s = 1 - \frac{6 \sum d_i^2}{n^3 - n}$$

em que:

r_s = coeficiente de Spearman.

d_i = diferença entre as ordens dos valores das variáveis correspondentes.

n = número de observações.

Para $n > 9$, a probabilidade de r_s não nulo é calculada utilizando o mesmo teste t bicaudal com $n - 2$ graus de liberdade.

O coeficiente τ de Kendall é também um coeficiente ordinal não-paramétrico e mede a força da dependência entre duas variáveis. Se para um par de dados qualquer, ambos variarem da mesma maneira em x e em y , ou seja, se ambos aumentarem ou diminuir, eles são chamados concordantes, caso contrário, são discordantes. Com isso, o coeficiente é calculado pela seguinte expressão:

$$\tau = \frac{n_c - n_d}{\frac{1}{2}n(n-1)}$$

em que:

τ = coeficiente de Kendall.

n_c = número de dados concordantes.

n_d = número de dados discordantes.

Schoch et al. (2017) afirmam que a ordenação dos valores é um fator importante nas medidas de centralidade, e que, portanto, o uso de coeficientes que consideram essa ordenação fornece resultados mais eficientes. Nesse sentido, o coeficiente r de Pearson não seria indicado para medir a correlação entre medidas de centralidade, pois este não considera a ordenação, mas apenas os valores absolutos das variáveis. Os autores recomendam utilizar o coeficiente τ de Kendall, alegando ser mais apropriado para esse tipo de avaliação, embora não seja muito comum e apresente valores menores que o coeficiente r de Pearson.

As correlações entre as medidas de centralidade foram calculadas para os três coeficientes apresentados – Pearson, Spearman e Kendall. Os valores encontram-se nas tabelas a seguir.

Tabela 1 – Coeficientes r de Pearson para a frequência e as medidas de centralidade

	Frequência	Grau	Grau total	Autovetor	Proximidade	Intermediação
Frequência		$4,1136 \cdot 10^{-17}$	$3,1045 \cdot 10^{-24}$	$3,4341 \cdot 10^{-11}$	$1,0731 \cdot 10^{-11}$	$3,9565 \cdot 10^{-13}$
Grau	0,92484		$1,3103 \cdot 10^{-20}$	$9,5432 \cdot 10^{-18}$	$2,1422 \cdot 10^{-20}$	$4,0805 \cdot 10^{-12}$
Grau total	0,96966	0,95197		$3,2815 \cdot 10^{-12}$	$3,8854 \cdot 10^{-14}$	$3,3638 \cdot 10^{-13}$
Autovetor	0,83619	0,93074	0,85717		$9,935 \cdot 10^{-17}$	$1,0487 \cdot 10^{-6}$
Proximidade	0,84697	0,95064	0,88933	0,92103		$1,7671 \cdot 10^{-9}$
Intermediação	0,8736	0,85535	0,87477	0,69229	0,79296	

* $p \leq 0,05$

Fonte: Past (RYAN et al., 1995).

Tabela 2 – Coeficientes r_s de Spearman para a frequência e as medidas de centralidade

	Frequência	Grau	Grau total	Autovetor	Proximidade	Intermediação
Frequência		$5,1924 \cdot 10^{-14}$	$1,7192 \cdot 10^{-16}$	$3,3352 \cdot 10^{-10}$	$1,207 \cdot 10^{-9}$	$1,0165 \cdot 10^{-9}$
Grau	0,88748		$1,4474 \cdot 10^{-20}$	$7,923 \cdot 10^{-15}$	$3,9785 \cdot 10^{-18}$	$1,9802 \cdot 10^{-16}$
Grau total	0,91856	0,9517		$3,9825 \cdot 10^{-12}$	$6,6071 \cdot 10^{-13}$	$2,0433 \cdot 10^{-12}$
Autovetor	0,81263	0,8989	0,85555		$1,5038 \cdot 10^{-16}$	$4,4296 \cdot 10^{-7}$
Proximidade	0,79766	0,93404	0,86981	0,91917		$4,0588 \cdot 10^{-10}$
Intermediação	0,79973	0,91791	0,86103	0,7088	0,81043	

* $p \leq 0,05$

Fonte: Past (RYAN et al., 1995).

Tabela 3 – Coeficientes τ de Kendall para a frequência e as medidas de centralidade

	Frequência	Grau	Grau total	Autovetor	Proximidade	Intermediação
Frequência		$6,4578 \cdot 10^{-12}$	$3,8328 \cdot 10^{-13}$	$7,4635 \cdot 10^{-9}$	$7,8389 \cdot 10^{-9}$	$7,605 \cdot 10^{-9}$
Grau	0,76632		$1,1819 \cdot 10^{-14}$	$1,1337 \cdot 10^{-11}$	$4,6843 \cdot 10^{-14}$	$3,2179 \cdot 10^{-12}$
Grau total	0,81008	0,86102		$1,0124 \cdot 10^{-9}$	$8,2243 \cdot 10^{-11}$	$5,593 \cdot 10^{-10}$
Autovetor	0,64483	0,75732	0,68135		$5,436 \cdot 10^{-13}$	$1,0659 \cdot 10^{-6}$
Proximidade	0,64391	0,84121	0,72474	0,80479		$3,407 \cdot 10^{-9}$
Intermediação	0,64448	0,77734	0,69184	0,54431	0,6594	

* $p \leq 0,05$

Fonte: Past (RYAN et al., 1995).

Os coeficientes de Spearman e de Kendall, por levarem em consideração o ordenamento das variáveis, são coincidentes, medindo a mesma coisa, ainda que apresentem valores distintos. O coeficiente de Pearson apresenta os maiores valores, indicando ter as correlações mais positivas para as variáveis medidas. Ele difere dos outros dois coeficientes por não levar em consideração o ordenamento, mas por fazer uma medida do valor absoluto das variáveis. No entanto, os três coeficientes apresentaram correlações positivas para todas as variáveis.

A proximidade apresentou sempre valores próximos aos de grau, grau total e autovetor. O grau é a medida de centralidade que melhor correlaciona com todas as demais, como mostram os três coeficientes, sendo a medida mais importante na rede. A frequência apresenta boa correlação com as demais medidas de centralidade, podendo ser analisadas juntas na determinação dos conceitos mais importantes. A intermediação é a medida cujos valores variam mais e a que apresenta as correlações mais baixas com as outras métricas. Dessa forma, para a determinação dos conceitos mais importantes são utilizadas as medidas de frequência e as medidas tipo grau – grau, grau total e autovetor. Ou seja, pode-se concluir que os conceitos mais importantes são aqueles de maior ocorrência no texto e que fazem mais ligações com outros conceitos. A análise dos nós da rede deve evidenciar essas duas características, permitindo identificar os conceitos mais centrais. A intermediação, embora seja uma medida importante, foi analisada separadamente, sendo mais importante na análise de aglomeração de nós.

6.1.2 Análise da rede conceitual para o trecho correspondente à introdução

Após a análise estatística, obteve-se a matriz de coocorrência pela análise de similitude. Importando a matriz para o Gephi (BASTIAN; HEYMANN; JACOMY, 2009), obtém-se a rede conceitual relacionando os 39 conceitos selecionados para esse trecho do texto. A Figura 30 apresenta a estrutura obtida para essa rede e o gráfico com a distribuição desses conceitos com relação à frequência:

Figura 30 – (a) Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais à frequência. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação à frequência no texto

Fonte: autoria própria (2020).

As características gerais da rede mostram que essa estrutura é formada por 39 nós e 172 arestas. O diâmetro é igual a 4, indicando a maior distância entre dois nós. Isso significa que partindo de um nó A qualquer, para se chegar a um nó B, o caminho máximo percorrido será igual a 4, ou seja, haverá até dois nós, C e D, no caminho entre os nós A e B. Essa medida dá uma ideia da proximidade dos conceitos. A densidade, que mede o quão próximo a rede está de ser completa, é igual a 0,232. Esse valor indica que está aproximadamente 23% completa e, portanto, não é uma rede densa. Pode-se verificar que a maioria das ligações está concentrada no centro.

Observando a frequência dos nós, destaca-se inicialmente a centralidade do conceito “molécula”, responsável pelo maior número de ligações, tanto em quantidade quanto em densidade. Estruturalmente, percebe-se ele se encontra no meio de duas regiões distintas unidas. A região superior é formada por conceitos relacionados aos tipos de interação, “forças de London”, “dipolo-dipolo”, “íon-dipolo”, dipolo-dipolo induzido”, “íon-íon” e “ligação de hidrogênio”, além do próprio conceito “interação”, e de outros que ligam esses conceitos, como “dipolo” e “polar”, que são propriedades moleculares, os conceitos básicos “energia” e “ligação”, e o conceito “íon”, partícula presente nas interações do tipo íon-dipolo. Analisando o contexto do texto, percebe-se que essa região corresponde à tabela dos tipos de interação intermolecular apresentada no capítulo. A região inferior, por sua vez, é formada por conceitos de diferentes categorias, sendo que se destacam aqueles relacionados aos estados físicos, “gás”, “sólido”, “líquido”, o próprio conceito de “fase” e, com menor frequência, o conceito “estado físico”. Além destes, há conceitos mais gerais relacionados às propriedades moleculares, “propriedades moleculares” e “propriedades atômicas”, às substâncias, “água” e “substância”, aos tipos de interação, “forças de atração”, “força” e “forças intermoleculares”, à estrutura molecular, “arranjo” e “estrutura”, o conceito “átomo”, partícula envolvida nas interações, o conceito “propriedades físicas”, e conceitos básicos, como “atração”, “repulsão”, “modelo” e “matéria”. Novamente, analisando o contexto do texto, percebe-se que essa região corresponde ao restante do texto da introdução, e o que une essas duas regiões da rede é o conceito “molécula”.

À primeira vista, portanto, conclui-se que esse é um conceito bastante importante para a compreensão do tema, sendo necessário analisar as relações conceituais que estabelece na rede, com o objetivo de compreender qual é a ideia de molécula apresentada pelos autores no texto. Uma estratégia é analisar a rede-ego de “molécula” (SMITH et al., 2009), cuja estrutura que é apresenta na Figura 31, a seguir.

Figura 31 – Rede-ego de “molécula” para o trecho do capítulo “Líquidos e sólidos” (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais à frequência. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

A rede-ego de “molécula” é formada por 28 nós e maioria dos conceitos corresponde às categorias de tipos de interação, indicando a espécie química que participa das interações. Nesse sentido, a única exceção é a interação íon-íon, por ser exclusivamente entre íons. A propriedade molecular presente é “polar”, ou seja, as moléculas polares estão presentes nos tipos de interação, com exceção das forças de London, cujas moléculas devem ser apolares. No entanto, essa informação não aparece na rede. Retomando o texto analisado, de fato, nesse trecho não há menção ao fato de nas forças de London as moléculas serem apolares. Essa explicação é apresentada posteriormente no tópico referente a esse tipo de interação. Para todos os demais tipos, no entanto, a característica polar das moléculas é fundamental para

a ocorrência de interação. Outras relações conceituais que merecem destaque nessa estrutura são as estabelecidas com os conceitos da categoria estado físico e com o conceito “propriedades físicas”. Percebe-se que esses conceitos apresentam muitas ligações entre si e ligações de alto peso, indicando alta coocorrência no texto. De fato, nesse trecho os autores ressaltam a todo o momento o papel das interações intermoleculares na compreensão da formação das fases da matéria e das propriedades físicas. A centralidade de “molécula” e as ligações com esses conceitos reforçam essas ideias.

Os demais conceitos que formam a rede-ego foram também analisados com base nas relações que estabelecem com “molécula”, levando em consideração o contexto em que ocorrem. A relação com os conceitos básicos “matéria”, “repulsão” e “atração”, reforça que propriedades físicas dependem da dinâmica de atração e repulsão das moléculas que constituem a matéria. Nesse mesmo contexto, a relação conceitual entre “molécula” e “modelo” especifica essa dinâmica ao aperfeiçoar o modelo cinético dos gases, assumindo que as partículas interagem. As relações com os conceitos “água” e “substância” reforçam a ideia de formação dos estados físicos em função das interações intermoleculares, ao apresentarem exemplos do texto que ilustram essa importância; como mostra a estrutura da rede, no entanto, essas relações acabam sendo mais periféricas, apenas reforçando a ideia central, e os dois conceitos apresentam frequência menor. Por fim, a relação entre “molécula” e “íon” ilustra a interação do tipo íon-dipolo, enquanto a relação entre “molécula” e “átomo” complementa a ideia de formação de fases condensadas e de propriedades físicas para os átomos.

A rede reproduziu com fidelidade o texto analisado. Além disso, as relações conceituais evidenciaram as principais ideias presentes, mostrando que a estratégia utilizada para transformar textos em redes conceituais foi útil e pode ser aplicada para o levantamento da estrutura conceitual referente ao tema, e que as relações conceituais analisadas em função do contexto devem ressaltar as ideias mais importantes para a compreensão das interações intermoleculares.

Quanto à análise das relações conceituais da rede-ego, ficou claro que compreender as propriedades moleculares que influenciam a polaridade das moléculas é importante para entender cada tipo de interação intermolecular, uma vez que a energia das interações varia em função de uma propriedade específica. Ficou clara também a importância de compreender o papel das interações intermoleculares

na formação das fases da matéria e como elas influenciam nas propriedades físicas. A análise da rede-ego permitiu extrair as ideias principais presentes no texto, que podem ser resumidas em:

- As forças intermoleculares apresentam energias específicas que decorrem do tipo de interação que se estabelece entre as moléculas.
- As fases da matéria e as propriedades físicas são consequência das interações entre as moléculas.
- Moléculas interagem e formam arranjos específicos que influenciam as propriedades físicas de líquidos e sólidos.
- As propriedades moleculares são importantes para a compreensão das características das interações intermoleculares.

Essas ideias estão presentes ao longo de todo o texto e estão de acordo com os princípios levantados anteriormente. Dessa forma, pode-se entendê-las como princípios conceituais das interações intermoleculares, de acordo com os pressupostos de Pozo e Crespo (2009). Esses princípios ajudam a estruturar o conhecimento sobre as interações intermoleculares e podem ser organizados na forma de um mapa conceitual, evidenciando as relações entre os conceitos na forma de proposições, como mostra a Figura 32 a seguir.

Figura 32 – Mapa conceitual com as principais proposições extraídas da rede-ego de "molécula" (CmapTools, v. 6.01.01)

Fonte: autoria própria (2020).

A frequência ressaltou que “molécula” é um conceito muito importante na rede e, conseqüentemente, para a compreensão o tema. As relações conceituais que estabelece com os demais conceitos também ressaltaram essa importância. No entanto, vale lembrar que frequência é uma medida de análise de textos. Para analisar os elementos da rede foram utilizadas as medidas de centralidade grau, grau total, autovetor, centralidade de proximidade e centralidade de intermediação, com o objetivo de estudar a centralidade dos nós cujas discussões são apresentadas nos próximos tópicos.

6.1.4 Medidas de centralidade de grau

As medidas de centralidade de grau procuram avaliar quais são os nós mais centrais da rede, pela análise do número de ligações que estabelecem (centralidade de grau, c_D), ao considerar o peso dessas ligações (centralidade de grau total, c_{TD}), e de sua importância baseada na centralidade dos nós vizinhos (centralidade de autovetor, c_A). As figuras a seguir (Figuras 33, 34 e 35) apresentam a estrutura da rede com destaque para as três medidas, e os gráficos da distribuição dos conceitos para cada uma delas.

Figura 33 – (a) Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação ao grau

Fonte: autoria própria (2020).

Figura 34 – (a) Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau total. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação ao grau total

Fonte: autoria própria (2020).

Figura 35 – (a) Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais ao autovetor. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação ao autovetor

Fonte: autoria própria (2020).

O grau médio e o grau total médio da rede são iguais a 8,821 e 14,821, respectivamente. Esses valores indicam que, na média, cada nó faz aproximadamente 9 ligações com outros nós, e que o somatório do peso dessas ligações é aproximadamente 15. O grau total médio é quase o dobro do grau médio, indicando que cada ligação teria peso igual a 2, ou seja, os conceitos ocorrem pelo menos duas vezes na mesma frase. Esse resultado reforça a ideia de que os conceitos estariam bastante próximos no texto.

O conceito “molécula” é central nos três casos, apresentando os maiores valores para as três medidas. Pelo valor do grau ($c_D = 27$), verifica-se que esse conceito faz 27 ligações no texto; já pelo valor de grau total ($c_{TD} = 69$), o somatório dos pesos dessas ligações é igual a 69, valor aproximadamente 2,5 vezes maior que o número de ligações. Esse valor é quase o dobro do valor de grau total para o segundo conceito que se destaca, “sólido” ($c_{TD} = 38$). Essa medida indica que, além de fazer muitas ligações, aparece muitas vezes com alguns conceitos específicos. Isso fica evidente na rede pela espessura das arestas que ligam “molécula” a outros conceitos como “interação”, “energia” ou “forças intermoleculares”. Com relação ao autovetor ($c_A = 1,0$), “molécula” apresenta o valor máximo, destacando-se como o conceito mais central dentre os mais centrais.

Comparando a distribuição dos conceitos, percebe-se que, assim como a frequência, nenhuma das três métricas diferencia bem os conceitos a ponto de permitir identificar com certa facilidade aqueles mais centrais e que formam um núcleo dos conceitos mais importantes.

Novamente, o conceito “molécula” se destacou como o mais importante, assumindo os maiores valores para todas as medidas. A análise da rede-ego já ressaltou as principais ideias relacionadas a esse conceito, que são apresentadas pelos autores no texto. A relação entre as propriedades moleculares e como elas influenciam na polaridade das moléculas é importante para o estudo dos diferentes tipos de interação intermolecular.

A frequência e as medidas de centralidade acabaram sendo equivalentes na determinação da centralidade dos nós, medindo aspectos relacionados ao número de coocorrências no texto. Nesse sentido, pode-se concluir que não há necessidade de usar todas elas durante a análise, mas sim selecionar apenas uma, por exemplo a centralidade de grau, para determinar a importância dos conceitos, assim como foi feito por Yun e Park (2018).

6.1.5 Medida de centralidade de proximidade

A medida de centralidade de proximidade (c_c) indica o quão próximo estão os conceitos na rede. Como ela se mostrou bem correlacionada com as demais medidas, foi utilizada para determinar os conceitos de maior destaque. A Figura 36 apresenta a estrutura da rede com destaque para essa medida e o gráfico de distribuição dos conceitos.

Figura 36 – (a) Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais à proximidade. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação à proximidade

Fonte: autoria própria (2020).

Mais uma vez, o conceito “molécula” se destacou dos demais apresentando o maior valor para essa medida. No entanto, para os demais conceitos, a centralidade de proximidade não diferenciou nenhum, como mostra o gráfico de distribuição dos conceitos. Isso indica que estão todos muito próximos, confirmando o que já havia sido levantado pela análise das demais métricas. Dessa forma, pode-se concluir que a centralidade de proximidade, embora apresente correlação positiva com as demais métricas, não serve para diferenciar os conceitos com base na estratégia utilizada para analisar o texto pelo critério de coocorrência.

6.1.6 Medida de centralidade de intermediação

A outra métrica utilizada na análise da rede conceitual foi a centralidade de intermediação (c_B), que mede quantas vezes um conceito aparece no caminho geodésico, ou seja, no menor caminho entre dois conceitos. A Figura 37 apresenta a estrutura da rede com destaque para essa medida e o gráfico de distribuição dos conceitos.

Figura 37 – (a) Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais à intermediação. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação à intermediação

Fonte: autoria própria (2020).

Como mostrou a estrutura da rede e o gráfico, o conceito “molécula” apresenta a maior intermediação ($c_B = 0,270373$). Isso significa que em aproximadamente 27%, ou seja, pouco mais de um quarto de todas as relações conceituais, “molécula” surge como um conceito importante. Diferentemente das outras métricas, a centralidade de intermediação diferencia os conceitos em basicamente dois tipos: aqueles que são periféricos, ou seja, que não intermedeiam nenhuma ligação, apresentando valor de intermediação $c_B = 0$ (por exemplo, os tipos de interação intermolecular e algumas propriedades moleculares) e aqueles que apresentam valores de intermediação diferentes de zero, podendo ser organizados em conceitos com alta e baixa intermediação (por exemplo, alguns conceitos de tipos de interação, como “interação” e “forças intermoleculares”, e estado físico, como “gás” e “sólido”). Pode-se notar que os conceitos de maior intermediação apresentam as ligações de maior peso entre si e entre outros conceitos na rede, reforçando a ideia de que eles intermedeiam a maioria das relações entre pares de conceitos.

Essa análise pode revelar que para uma melhor compreensão das interações intermoleculares é necessário analisar as relações conceituais que os conceitos de maior intermediação estabelecem. No entanto, é importante lembrar que esse resultado corresponde a um trecho do texto, no qual os tipos de interação intermolecular surgem como conceitos periféricos. Ou seja, a centralidade de intermediação pode ser mais útil na análise do texto completo, no qual todos os conceitos estão presentes, ou quando se pretende analisar grupos, evidenciando os conceitos que estabelecem relações entre os grupos.

Outro ponto importante é o fato de que “molécula” se mostrou como o conceito central para o tema. Ou seja, a compreensão de como esse conceito se relaciona com os demais, quais ligações estabelece e quais os contextos de cada uma, como ficou claro pela análise da rede-ego, é fundamental para o estudo das interações intermoleculares de acordo com texto e deve ressaltar, como sugere o contexto, as ideias que os autores apresentam para esse conceito. O questionamento que surge, portanto, é sobre o que acontece com a estrutura da rede se “molécula” for retirado.

6.1.7 Análise de aglomeração da rede sem “molécula”

Apesar dos aspectos levantados na literatura com relação ao tempo gasto pelo algoritmo GN (NEWMAN, 2004; CLAUSET; NEWMAN; MOORE, 2004; BOTELHO; SOUSA, 2011), ele se torna relevante para redes com muitos nós, o que não é o caso neste trabalho. Dessa forma, optou-se por usar os dois algoritmos – GN e Modularidade – para determinar as aglomerações de nós da rede. Novamente, por se tratar de um estudo exploratório, no qual o objetivo é identificar os grupos presentes na rede e como cada algoritmo diferencia tais grupos, quais são as semelhanças e as diferenças de cada um, e o que esses aspectos permitem concluir da análise da rede, a utilização dos dois métodos se justifica. Para essa análise, o conceito “molécula” foi excluído da rede e as estruturas obtidas pelos dois algoritmos são apresentadas na Figura 38.

Figura 38 – Rede conceitual para o trecho do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais à intermediação. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco). As cores dos rótulos correspondem aos *clusters* obtidos por (a) modularidade e (b) GN; cores iguais indicam nós da mesma comunidade (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas).

(a)

(b)

Fonte: autoria própria (2020).

Em (a), a modularidade agrupou os nós em 4 *clusters* identificados pelas cores dos rótulos (preto, verde, laranja e azul). Em (b), o algoritmo GN agrupou os nós em 3 *clusters* – o conceito “forças de London” foi diferenciado como um *cluster*, mas como não faz sentido mantê-lo isolado, para o contexto desta análise sobre as interações intermoleculares, optou-se por inseri-lo no *cluster* em preto. Assim como a modularidade, cada *cluster* é identificado pela cor do rótulo (preto, verde e azul). A diferença entre os dois algoritmos é que enquanto GN agrupou uma região de nós em um único *cluster* (verde), a modularidade separou esse *cluster* em dois (verde e laranja), mas é possível identificar, em cada um, um trecho do texto. O *cluster* em azul, por exemplo, é formado pelos nós cujos conceitos descrevem a equação de energia potencial; o *cluster* em preto corresponde à tabela dos tipos de interação; o restante do texto, ou seja, os trechos correspondentes à introdução e ao início do tópico “Formação de fases condensadas” são descritos pelo *cluster* em verde (GN). Para a modularidade, a divisão desse *cluster* em dois sugere um agrupamento de conceitos relacionados aos estados físicos (em verde) e às propriedades moleculares e físicas (em laranja).

Com a retirada de “molécula” evidenciaram-se os conceitos de maior intermediação em cada *cluster*. Além de intermediarem as ligações internamente, eles são responsáveis por intermediar as ligações entre conceitos de diferentes *clusters*, ressaltando a importância deles em manter a estrutura da rede intacta e como conceitos centrais para a compreensão das interações intermoleculares. Como sugere a estrutura da rede, são os conceitos “energia”, “íon”, “gás”, “sólido”, “interação”, “propriedades físicas”, “interações intermoleculares”, “forças intermoleculares”, “energia potencial”, “matéria”, “líquido” e “átomo”. O conceito “energia” ($c_B = 0,16$) tem quatro ligações com conceitos de outros *clusters*: “interações intermoleculares”, “átomo”, “sólido” e “arranjo”. Essas relações ressaltam a ideia de que cada tipo de interação intermolecular tem uma energia típica associada, e que os átomos – e as demais partículas que constituem a matéria – podem se organizar em uma estrutura sólida com arranjos específicos, caso não tenham energia suficiente para vencer as interações.

O segundo conceito, “íon” ($c_B = 0,13$), se conecta aos dois outros *clusters* por meio de nove ligações com os seguintes conceitos: “dipolo”, “distância”, “energia potencial”, “sólido”, “líquido”, “arranjo”, “átomo”, “força” e “água”. Essas relações mostram que a energia potencial é influenciada pela distância entre íons ou entre íons e moléculas que interagem, como é o caso de íons solvatados em água, exemplificado no texto pelo fenômeno da hidratação. Além disso, assim como átomos e moléculas,

íons também interagem entre si e, quando não apresentam energia suficiente para superar a energia associada à interação, eles se organizam em sólidos com arranjos específicos.

O conceito “gás” ($c_B = 0,11$) apresenta duas ligações com conceitos de *clusters* diferentes – seis, pelo algoritmo da modularidade. São eles: “interações coulômbicas” e “energia potencial”. Considerando a aglomeração pela modularidade, há ainda os conceitos “atração”, “repulsão”, “modelo” e “propriedades física”, ressaltando a ideia do modelo cinético das partículas aperfeiçoado, que considera a atração e a repulsão das partículas no gás.

O próximo conceito, “sólido” ($c_B = 0,11$), estabelece duas ligações entre *clusters* com os conceitos “íon” e “energia” – mais duas com os conceitos “propriedades físicas” e “estrutura”, considerando a aglomeração pela modularidade. Novamente, essas relações afirmam que os sólidos se formam quando a energia da interação é suficientemente grande para manter as partículas unidas, sejam elas átomos, moléculas ou íons, e essa organização e essa energia associadas são as responsáveis pelas propriedades físicas nos sólidos.

O conceito “interação” ($c_B = 0,10$) se liga a quatro conceitos de outro *cluster*: “dipolo”, “distância”, “energia potencial” e “interações intermoleculares”. Dessas relações, a ideia principal que se ressalta é a da diferença das energias potenciais em função da distância para os tipos de interação.

Considerando o algoritmo GN, o conceito “propriedades físicas” ($c_B = 0,10$) se liga a apenas um conceito de outro *cluster*, “interações intermoleculares”, que reforça a relação entre as interações e as propriedades físicas. Ao se considerar a modularidade, os demais conceitos que se ligam a ele, “forças intermoleculares”, “arranjo”, “átomo”, “substância”, “sólido”, “líquido”, “gás” e “matéria”, ampliam essa ideia ao evidenciar que as interações também são responsáveis pelos estados físicos da matéria, e que dependem do arranjo das partículas.

Para o conceito “interações intermoleculares” ($c_B = 0,09$), há cinco ligações entre *clusters* com os conceitos “interação”, “energia”, “propriedades atômicas”, “propriedades moleculares” e “propriedades físicas”. Nesse caso, essas relações reforçam a ideia do parágrafo anterior ao incluir, além do arranjo e das interações intermoleculares, as propriedades atômicas e moleculares na determinação das propriedades físicas.

O conceito “forças intermoleculares” ($c_B = 0,07$) se relaciona com os conceitos “interações coulômbicas”, “energia potencial”, “ligação” e “propriedades físicas”, cuja ideia é a de que as propriedades físicas são consequência das forças intermoleculares.

Para o conceito “energia potencial” ($c_B = 0,06$), as relações entre *clusters* se estabelecem com os conceitos “interação”, “íon”, “gás” e “forças intermoleculares”, sendo que apenas a relação com “íon” apresenta uma ideia importante para o tema ao associar, como já foi feito anteriormente, a variação da energia potencial com a distância entre as partículas que interagem, íons, dipolos etc.

O conceito “matéria” ($c_B = 0,05$) se liga aos conceitos “estrutura”, “propriedades moleculares”, “propriedade atômicas”, “propriedades físicas” e “modelo”. Novamente, essas relações evidenciam a ideia de que as propriedades atômico-moleculares e a estrutura definem as propriedades físicas da matéria.

O conceito “líquido” ($c_B = 0,05$) se liga aos conceitos “íon”, “propriedades físicas” e “estrutura”, cuja ideia mais importante está relacionada ao fato de a organização das partículas nos líquidos influenciarem as propriedades físicas da substância.

Por fim, o conceito “átomo” ($c_B = 0,04$) se liga aos conceitos “energia”, “íon”, “interação” e “ligação” e ressalta a ideia de que quando os átomos não têm energia suficiente para vencer a interação entre eles, forma-se uma fase condensada.

Em resumo, a análise das relações conceituais entre *clusters* ressaltou ideias importantes para a compreensão das interações intermoleculares que podem ser sintetizadas nos seguintes itens:

- As interações intermoleculares têm energias típicas associadas a cada uma e envolvem pelo menos uma carga iônica ou uma molécula polar – a exceção fica para as forças de London, as quais estão presentes em todos os tipos de moléculas, polares e apolares.
- As interações intermoleculares são de natureza eletrostática – com exceção da ligação de hidrogênio – e a intensidade está relacionada à carga elétrica das partículas e à distância entre elas.
- As propriedades físicas são decorrentes das propriedades atômico-moleculares e da estrutura das moléculas.
- As fases da matéria existem em função das interações intermoleculares.

Ao evidenciar essas relações no ensino das interações intermoleculares, pode-se favorecer a aprendizagem ao permitir que os alunos estabeleçam essas relações conceituais na estrutura mental de conhecimento.

6.1.8 Definição e análise do núcleo

Assumindo que no processo de aprendizagem a estrutura do conhecimento se modifica e novos conceitos interagem com conceitos já existentes (NOVAK; GOWIN, 1984), a ideia de que pode haver um núcleo nessa estrutura sugere a existência de informações essenciais para a compreensão de um assunto. Essas informações seriam descritas pelas relações conceituais presentes nesse núcleo, podendo se assumir que estas seriam princípios conceituais, como afirmam Pozo e Crespo (2009), uma vez que estariam presentes em todo o conteúdo e teriam a função de estruturar a rede de conhecimento, sem as quais, essa estrutura se modificaria. A hipótese levantada é de que a análise de redes pode ser útil para evidenciar os conceitos que compõem esse núcleo, por meio do estudo das métricas associadas a cada nó.

As medidas de centralidade não permitiram diferenciar ou diferenciaram muito pouco os conceitos a ponto de definir um núcleo. Dessa forma, a estratégia adotada foi selecionar o primeiro quartil, ou seja, 25% do total de conceitos que mais se destacaram, assumindo que nessa fração os conceitos apresentam os maiores valores absolutos para cada uma das medidas de centralidade. Do total de 39 conceitos, o primeiro quartil compreende aproximadamente os 10 primeiros para cada métrica ($39 \cdot 0,25 = 9,75 \cong 10$). O gráfico da Figura 39, a seguir, mostra os valores de cada métrica para os conceitos do primeiro quartil.

Figura 39 – Gráfico da distribuição da frequência e das medidas de centralidade de grau, grau total e autovetor para os conceitos do primeiro quartil. Os valores de autovetor foram multiplicados por 10 para facilitar a comparação com as demais medidas

Fonte: autoria própria (2020).

Observando o gráfico, percebe-se que entre as métricas há pouca variação na ordenação dos conceitos, confirmando o que a análise das redes mostrou: que qualquer uma dessas métricas pode ser utilizada para determinar os conceitos mais importantes da rede.

O núcleo da rede é formado pelos conceitos “molécula”, “interação”, “líquido”, “sólido”, “gás”, “propriedades físicas”, “fase”, “energia”, “forças intermoleculares” e “matéria”, que são conceitos pertencentes às categorias de estrutura molecular, tipos de interação, estado físico, propriedade física e conceitos básicos. A estrutura que emerge das relações entre esses conceitos é apresentada na Figura 40, a seguir.

Figura 40 – Rede conceitual do núcleo extraído segundo as medidas de centralidade. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); propriedade física (cinza); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Analisando a estrutura obtida, trata-se de uma rede bastante densa em que praticamente todas as ligações têm alto peso, indicando a força dessas relações conceituais. O conceito “molécula” se mantém como central e estabelece quase todas as ligações entre as duas regiões da rede. A única exceção é a ligação que se forma entre “energia” e “sólido”. Quanto às relações conceituais, ressalta-se a ideia de que as interações intermoleculares são fenômenos que envolvem energia, uma vez que considera as forças de atração e repulsão entre as partículas. Como consequência, as interações definem as propriedades físicas e os estados físicos da matéria. Isso está de acordo com a ideia principal das interações intermoleculares, que é o fato de estarem relacionadas com as propriedades termodinâmicas de líquidos, sólidos e gases (ROCHA, 2001), além de relacionar de forma direta aspectos submicroscópicos, de natureza atômico-molecular, e macroscópicos, acessíveis à observação direta (HERBST; MONTEIRO FILHO, 2019), e pode ser sintetizada na forma de um mapa conceitual, como mostra a Figura 41, a seguir.

Figura 41 – Mapa conceitual que descreve a ideia central do tema interações intermoleculares (CmapTools, v 6.01.01)

Fonte: autoria própria (2020).

A análise da rede e o uso das métricas se mostraram úteis para determinar um núcleo de conceitos que descrevem a ideia principal relacionada ao tema interações intermoleculares, como propunha a hipótese levantada.

No processo de aprendizagem, é fundamental que a ideia central sobre as interações intermoleculares esteja evidente aos alunos, por exemplo, na forma de um mapa conceitual como o apresentado. Dessa forma, pode-se garantir uma compreensão mais eficiente sobre o tema, permitindo analisar aspectos mais específicos das interações, como as características de cada tipo.

6.1.9 Análise da rede conceitual sem o núcleo

Após a definição do núcleo, o questionamento que se faz é com relação à estrutura da rede e o que acontece com ela ao ser retirado o núcleo. Ela permanece? Quais são as relações conceituais que se mantêm e quais são desfeitas? Na tentativa de responder a essas questões, obteve-se a estrutura apresentada na Figura 42.

Figura 42 – Rede conceitual após a retirada do núcleo. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Com a retirada do núcleo, a estrutura da rede foi desfeita, apresentando apenas alguns grupos isolados de nós, mas unidos por ligações fracas, indicando que os conceitos do núcleo são os responsáveis por estabelecer a maior parte das ligações na rede, tanto em quantidade quanto em peso. Os conceitos “forças de London”, “fases condensadas”, “estado físico” e “forças de atração” ficaram fora da rede, não estabelecendo ligação com nenhum conceito além daqueles que compõem o núcleo.

Dessa forma, foram excluídos da nova estrutura obtida. Outro dado interessante é que o diâmetro aumentou para 8, dobrando de tamanho. Isso indica que os conceitos estão mais afastados e que é necessário percorrer uma distância maior para alcançar os conceitos mais distantes, ressaltando a importância do núcleo em estabelecer as pontes entre os conceitos da rede.

Os conceitos que mais se destacam são aqueles relacionados aos tipos de interação intermolecular, às propriedades moleculares e conceitos básicos que descrevem o modelo de atração e repulsão, e a equação de energia potencial. O conceito “íon” se tornou central, mantendo a estrutura da rede intacta, na qual é possível identificar em cada pequeno grupo os trechos do texto aos quais fazem referência.

Pode-se concluir que essa análise permitiu evidenciar as relações conceituais mais importantes do texto. O núcleo, de fato, trouxe a ideia central das interações intermoleculares, podendo assumir que se trata de um princípio conceitual do tema, de acordo com Pozo e Crespo (2009). Ao retirar esse núcleo, percebe-se que a estrutura da rede se desfaz, reforçando a ideia de conteúdos conceituais apresentada pelos autores, ao deixar claro que o princípio fundamental do tema estrutura a rede de conhecimento.

CAPÍTULO 7

Análise da rede conceitual do texto completo

As análises conduzidas até aqui mostraram ser possível utilizar as métricas de análise de rede para obter a estrutura conceitual de um texto com base em conceitos pré-selecionados, e permitiram identificar os conceitos mais importantes. As análises conceituais ressaltaram informações importantes para o estudo das interações intermoleculares e a estrutura da rede reproduziu com fidelidade as partes do texto.

Dessa forma, a próxima etapa do trabalho consistiu em aplicar a mesma metodologia, agora para o texto completo, que corresponde a todos os tópicos da seção 1, e determinar a estrutura conceitual que descreve esse texto, levando em consideração todos os tipos de interação intermolecular estudados no capítulo.

Os resultados da análise anterior mostraram que a frequência e as medidas de centralidade de grau são equivalentes, não havendo necessidade de utilizar todas para o estudo da centralidade dos nós, já que medem a mesma coisa. A centralidade de proximidade também não foi útil para analisar os nós da rede por estarem todos muito próximos, não diferenciando nenhum deles. A centralidade de intermediação, por sua vez, se mostrou interessante para esse tipo de análise, permitindo uma diferenciação evidente entre nós centrais e periféricos, além de ser útil para analisar os nós que mais intermedeiam relações conceituais, associada à análise dos *clusters*. Dessa forma, definiu-se como estratégia para a análise de redes o uso apenas da centralidade de grau e da centralidade de intermediação, tomando como referência o trabalho de Yun e Park (2018).

Para a centralidade de grau, a estrutura obtida para a rede conceitual é apresentada na Figura 43, com o gráfico da distribuição dos conceitos em função dessa medida.

Figura 43 – (a) Rede conceitual para o texto do capítulo "Líquidos e sólidos" (ATKINS; JONES, 2012). Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas). (b) Gráfico da distribuição dos conceitos com relação ao grau

Grau

Fonte: autoria própria (2020).

A estrutura geral da rede apresenta diâmetro igual a 3, reforçando a ideia de que os conceitos estão muito próximos, e densidade igual a 0,257, mostrando que trata-se de uma rede pouco densa, com as ligações de maior peso concentradas no centro da estrutura; os conceitos da periferia se ligam aos demais por ligações mais fracas. Os nós mais centrais são referentes aos conceitos “molécula” ($c_D = 57$) e “interação” ($c_D = 41$). Percebe-se que ambos se destacam bastante dos demais, o que já era esperado para “molécula”, visto que esse conceito se destacou em todas as medidas. No entanto, “interação” também foi destaque no texto completo e a relação entre ambos é a mais forte, o que faz sentido, visto que o tema estudado no capítulo é sobre interação entre as moléculas. Por se destacarem muito dos demais, pode-se concluir que estes conceitos constituem o núcleo dessa estrutura. De fato, ambos já fazem parte do núcleo definido para o texto menor e, portanto, é razoável afirmar que fazem parte deste também. Dessa forma, ambos foram excluídos da rede com o objetivo de analisar como eles contribuem para a estrutura conceitual. A Figura 44, a seguir, apresenta essa estrutura resultante.

dipolo” e “eletronegatividade”, para citar alguns. No centro desse *cluster*, os conceitos básicos “energia”, “energia potencial” e “distância” estabelecem a maioria das ligações entre esses nós e o restante da rede, apresentando as maiores intermediações nesse grupo. Esses conceitos descrevem a equação de energia potencial e, portanto, essas relações conceituais confirmam a natureza eletrostática das interações intermoleculares presentes no *cluster*.

Em laranja, o segundo *cluster* também traz conceitos relacionados às interações intermoleculares, mais especificamente às interações do tipo íon-íon, íon-dipolo e ligação de hidrogênio, além de conceitos que descrevem características dessas interações, como: a propriedade molecular “carga parcial”, essencial para que ocorram e que estabelece as ligações entre as diferentes partículas e as interações; “água” e “íon”, que são conceitos específicos que descrevem o fenômeno da hidratação utilizado no capítulo para exemplificar as interações íon-dipolo; e as espécies “hidrogênio” e “átomo”, ressaltando a interação do tipo ligação de hidrogênio.

Percebe-se que houve uma separação considerando as energias de cada interação, em que as interações mais fortes ficaram em um grupo, enquanto as mais fracas ficaram em outro. Os conceitos de mais forte e mais fraco podem ser considerados com base, por exemplo, na tabela de energias típicas das interações apresentada anteriormente no capítulo.

Um pequeno *cluster* em azul, formado por apenas três nós, sendo eles “ponto de ebulição”, “ponto de fusão” e “substância”, descreve uma tabela apresentada no texto que compara as diferenças nessas duas propriedades físicas para diferentes substâncias e cujo objetivo é mostrar como as propriedades variam em função das forças de London, que atuam em todos os tipos de molécula, ressaltando a universalidade dessa interação (JUNQUEIRA, 2017).

Por fim, no *cluster* em verde, os conceitos correspondem aos aspectos macroscópicos das interações intermoleculares, que são os estados físicos e as propriedades físicas da matéria. De fato, os conceitos de maior intermediação nesse grupo são “propriedades físicas”, “forças intermoleculares”, “gás”, “líquido” e “sólido”, reforçando essa ideia.

Com a retirada de “molécula” e “interação”, ficaram evidentes os quatro grupos de conceitos analisados. Em cada um, há um contexto específico apresentando as ideias mais importantes para explicar cada grupo.

A aglomeração associada à centralidade de intermediação mostrou-se novamente eficaz para esse tipo de análise, ao ressaltar as relações mais importantes em um grupo e entre grupos, e que trazem as principais ideias relacionadas ao tema interações intermoleculares.

7.1 Definição e análise do núcleo

O fato de os conceitos estarem muito próximos entre si se traduz na rede como a dificuldade de diferenciação entre eles pelas métricas. Dessa forma, a estratégia utilizada para a determinação do núcleo dessa estrutura foi a mesma aplicada na análise anterior: selecionar o primeiro quartil de conceitos.

Dos 66 conceitos, o primeiro quartil corresponde a aproximadamente 17 ($66 \cdot 0,25 = 16,5 \cong 17$). Portanto, o núcleo é definido pelos 17 primeiros conceitos destacados segundo a centralidade de grau. A estrutura formada por esses conceitos é apresentada na Figura 45, a seguir.

Figura 45 – Núcleo formado pelo primeiro quartil de conceitos. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Ao comparar este núcleo com o da Figura 40, percebe-se que este expande as ideias apresentadas pelo anterior ao incluir novos conceitos. O princípio fundamental de que as interações intermoleculares são fenômenos que envolvem energia e que definem as propriedades e estados físicos da matéria se mantém, mas novas relações estão presentes e ajudam a reforçar essa ideia. Os conceitos “carga parcial”, “polar” e “momento de dipolo” descrevem as propriedades moleculares que influenciam nos tipos de interação; os conceitos “átomo” e “íon” expandem o fenômeno de interação, mostrando ser universal a todas as partículas da matéria, sejam elas moléculas ou átomos; “hidrogênio” e “água”, são, respectivamente, a espécie e a substância mais citadas no capítulo e, neste contexto, estão relacionados às interações do tipo íon-dipolo e ligação de hidrogênio; e a ideia de energia é expandida ao relacionar os conceitos “energia potencial” e “distância”, reforçando mais uma vez a natureza eletrostática das interações.

Da mesma forma que a análise anterior, a retirada do núcleo impacta na estrutura da rede, como apresentado na Figura 46, a seguir.

Figura 46 - Rede conceitual sem o núcleo. Os diâmetros dos nós são proporcionais à intermediação. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); estado físico (azul); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco). As cores dos rótulos correspondem às comunidades obtidas por modularidade (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Inicialmente, percebeu-se que os conceitos “solvente” e “orientação” ficaram de fora da rede, já indicando que a estrutura se desfez. Para os conceitos restantes há apenas ligações fracas, com exceção da tríada “substância”, “ponto de fusão”, “ponto de ebulição”. Muitos deles são conceitos relacionados às propriedades moleculares e aos tipos de interação intermolecular, além de conceitos básicos e de outras categorias. O

interessante, no entanto, é que as relações conceituais presentes ressaltam as características de cada tipo de interação, como as propriedades moleculares que influenciam na energia ou as espécies químicas que interagem por determinado tipo.

A análise da rede completa confirmou novamente a hipótese apresentada no início de que as métricas permitem levantar a estrutura conceitual do tema. Além disso, a ideia central do núcleo se manteve e foi expandida por novos conceitos, confirmando a ideia de Pozo e Crespo (2009) de que as interações são um princípio da Química, e estando de acordo com Novak e Gowin (1984) quando afirmam que o processo de aprendizagem é contínuo, em que ocorre reorganização das conexões significativas entre os conceitos, nas quais novos conceitos adquiridos pelo aluno se relacionam com os já existentes, modificando a estrutura conceitual presente.

Conclui-se que o núcleo descreve o princípio conceitual do tema. Ao ser retirado da rede, as relações conceituais que sobram descrevem aspectos específicos de cada interação intermolecular. Portanto, as métricas serviram para levantar a estrutura conceitual das interações intermoleculares presente no livro, ressaltando as características de cada tipo de interação, e para mostrar que o núcleo estrutura essa rede de conhecimento, apresentando a ideia principal para o tema.

7.2 Relação entre os tipos de interação intermolecular

O capítulo “Líquidos e sólidos” (ATKINS; JONES, 2012) está organizado por tipos de interação intermolecular, apresentando as características de cada uma. Já foi apontado que essa forma classificatória de organizar o conteúdo, em que cada interação é estudada de forma individual, pode trazer consequências para o processo de aprendizagem, passando a ideia de que os diferentes tipos de interação agem um de cada vez entre as moléculas, o que não é correto. Em um sistema são encontrados vários tipos de interação intermolecular atuando ao mesmo tempo, e cada um contribui com uma parcela para a energia total da interação (JUNQUEIRA, 2017). No processo de aprendizagem, para uma compreensão mais completa sobre a intensidade das interações intermoleculares, os alunos realmente precisam entender a importância aditiva das interações em um mesmo sistema (JASIEN, 2008).

Nesse sentido, a última parte deste trabalho consistiu em analisar a estrutura conceitual levantada para o texto completo e, aplicando as métricas de análise de rede,

verificar se é possível ressaltar as relações conceituais que unem pares de tipos de interação intermolecular, identificando os conceitos que são comuns a ambos, especialmente aqueles relacionados às propriedades moleculares. A hipótese é de que essa estratégia facilite a compreensão de que as interações podem atuar ao mesmo tempo em um sistema, uma vez que as mesmas propriedades moleculares devem influenciar tipos diferentes de interação intermolecular. As interações íon-íon diferem das demais pelo fato de estarem envolvidas apenas espécies iônicas. O texto não aborda essa interação com detalhe, mas a característica que acaba sendo comum apenas com as interações do tipo íon-dipolo é a carga elétrica dos íons, além da natureza eletrostática, já discutida anteriormente. Para as demais interações, as figuras a seguir apresentam recortes da rede completa evidenciando os conceitos comuns a eles.

Figura 47 – Rede conceitual para as interações íon-dipolo e dipolo-dipolo. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade molecular (amarelo); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Para os dois tipos de interação, a rede evidencia as espécies química envolvidas, “molécula” e “íon”. As propriedades moleculares, “carga parcial”, “polar” e “dipolo” são comuns a ambas e indicam que a intensidade dessas interações é influenciada por essas propriedades. Nesse sentido, a ideia de que as moléculas devem ser polares e que a interação ocorre por meio das cargas parciais de dipolos fica evidenciada. A natureza eletrostática dessas interações também está destacada pelas relações conceituais entre os nós cujos conceitos descrevem a equação de energia potencial.

Figura 48 – Rede conceitual para as interações íon-dipolo e forças de London. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Neste caso, as interações não apresentam características comuns, uma vez que uma ocorre com moléculas polares, enquanto a outra, apenas entre moléculas apolares. No entanto, o texto apresenta as interações do tipo dipolo-dipolo induzido relacionado às forças de London, que, aí sim, apresenta propriedades comuns com a interação íon-dipolo que é o fato de ocorrer com moléculas polares, por meio de dipolos elétricos, como evidencia a rede. Da mesma forma que para as demais interações, os conceitos relacionados à equação de energia potencial são novamente ressaltados aqui.

Figura 49 – Rede conceitual para as interações íon-dipolo e ligação de hidrogênio. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Para estes tipos de interação, a carga parcial é a propriedade molecular comum, ou seja, em ambas estão envolvidas moléculas polares. Dessa forma, a contribuição de cada uma leva em consideração as espécies envolvidas para decidir se a energia total da interação depende mais fortemente da interação íon-dipolo ou da ligação de hidrogênio. Outro ponto interessante neste recorte é que aqueles conceitos que descrevem a equação de energia potencial não estão presentes, já que estão relacionados à natureza eletrostática, diferente da natureza das ligações de hidrogênio.

Figura 50 – Rede conceitual para as interações dipolo-dipolo e forças de London. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Nas forças de London estão envolvidas moléculas apolares, enquanto nas interações dipolo-dipolo, as moléculas são polares. O recorte da rede, portanto, evidencia as propriedades moleculares comuns não às forças de London, mas às interações dipolo-dipolo induzido, da mesma forma que foi feito com as interações íon-dipolo. Novamente, a natureza eletrostática de ambas as interações fica evidente pelos conceitos relacionados à equação eletrostática que a descreve.

Figura 51 – Rede conceitual para as interações dipolo-dipolo e ligação de hidrogênio. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); propriedade molecular (amarelo); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Neste caso, a carga parcial é a propriedade molecular comum aos dois tipos de interação. O recorte da rede evidencia ainda o conceito “hidrogênio”, específico para as ligações de hidrogênio, cuja natureza não é eletrostática, como fica evidente na rede pela ausência dos cujos conceitos que descrevem a equação.

Figura 52 – Rede conceitual para as interações forças de London e ligação de hidrogênio. Os diâmetros dos nós são proporcionais ao grau. As cores dos nós representam as categorias: estrutura molecular (verde); tipos de interação (vermelho); partícula (roxo); propriedade física (cinza); substância (rosa); conceitos básicos (branco) (Gephi 0.9.2, distribuição Force Atlas)

Fonte: autoria própria (2020).

Para esses dois tipos de interação é interessante perceber que não há propriedades moleculares comuns. O recorte da rede evidencia esse fato de que a natureza das duas interações é diferente. Enquanto as forças de London são interações específicas das moléculas apolares, nas ligações de hidrogênio estão envolvidas moléculas polares, nas quais há grande diferença de eletronegatividade entre o átomo de hidrogênio e o átomo ao qual está ligado. No contexto do capítulo, os conceitos comuns apresentados, “oxigênio”, “água”, “hidrogênio” e “ponto de ebulição”, estão relacionados à tabela que compara essa propriedade para diferentes substâncias, evidenciando a intensidade das forças de London em função da polarizabilidade das moléculas.

Essa análise ajudou a verificar características comuns entre as interações intermoleculares por meio das estruturas obtidas, reforçando que todas contribuem para a energia total do sistema com parcelas distintas. Outro aspecto que ficou evidente, e que foi reforçado nessa análise, é a natureza eletrostática das interações. Nesse sentido, todas são influenciadas pela distância que separa as partículas e por uma propriedade molecular específica, que vai depender do tipo de interação intermolecular. A exceção está na ligação de hidrogênio, cuja natureza é covalente, conforme apresentaram Weinhold e Klein (2014).

Esses aspectos deveriam ser apresentados de forma explícita no texto, pois dessa maneira poderiam contribuir positivamente para a compreensão dos alunos sobre as características das interações intermoleculares.

CAPÍTULO 8

Conclusão

O objetivo principal deste trabalho era obter a estrutura conceitual sobre as interações intermoleculares presente em um livro didático, e analisar quais informações estão presentes, de que forma elas aparecem na rede e se a análise das relações conceituais pode contribuir, de alguma forma, para elucidar as ideias mais importantes sobre o tema, favorecendo uma compreensão maior sobre as interações intermoleculares. Para isso, trabalhou-se com dois referenciais que foram complementares para a conclusão obtida: a ideia de conteúdos conceituais e a análise de redes conceituais utilizando métricas de análise extraídas da Teoria de Redes Complexas.

Inicialmente, a análise do livro didático mostrou que as interações intermoleculares estão presentes em diferentes momentos, mas são apresentadas formalmente em um capítulo dedicado ao estudo de líquidos e sólidos. A presença ao longo do livro já é uma evidência da importância das interações para a compreensão de diferentes temas. No entanto, o capítulo trabalha esse conteúdo de forma classificatória e a própria maneira como está organizado reforça essa abordagem: ao fazer uma discussão inicial com exemplos nos quais um tipo de interação é mais relevante; ao apresentar dados de propriedades físicas (na maioria das vezes, relacionados à temperatura de ebulição) que permitem uma discussão sobre as propriedades de cada interação e como elas influenciam as propriedades macroscópicas; e ao sintetizar as informações apresentadas na forma de uma ideia geral. Nesse sentido, há vantagens e desvantagens: como vantagem, pode-se citar o fato de que o estudo individualizado de cada tipo de interação permite compreender as características de cada um, como as propriedades moleculares influenciam a energia da interação ou quais partículas estão envolvidas; no entanto, como desvantagem, pode reforçar ideias equivocadas, por exemplo de que as interações intermoleculares agem individualmente no sistema, ou que uma interação é mais importante que a outra. Extrapolando essa ideia, a forma como o assunto é abordado não permite compreender como as interações intermoleculares estão relacionadas e quando uma se sobressai às demais. Essa análise se limitou a um livro didático, mas pode-se levantar o questionamento de se essas informações ficam mais claras ao expandir o estudo para mais livros, incluindo materiais mais específicos, que apresentem esse tema de forma mais aprofundada. No entanto, foge ao escopo desta pesquisa.

A identificação dos conteúdos conceituais se mostrou uma tarefa não trivial, no sentido de que estes não são facilmente identificados, sendo necessárias diversas leituras exaustivas do texto, analisando cuidadosamente as relações descritas. Nesse sentido, o conhecimento químico do assunto foi fundamental, ou seja, o entendimento que se tem sobre as interações intermoleculares, sobre quais são os conceitos mais importantes envolvidos e sobre o contexto em que se encontram no capítulo permitiu trabalhar com esses conteúdos conceituais. No entanto, essa identificação dos conteúdos conceituais foi feita e mostrou que estes estão relacionados. Os fatos e dados são informações que ilustram ou exemplificam uma explicação; os conceitos dão significados aos dados e constituem os nós da rede que representa a estrutura conceitual, mostrando que estão relacionados e que devem ser interpretados considerando-se essas relações; os princípios, por sua vez, por serem ideias muito gerais, exigem uma interpretação mais aprofundada das relações conceituais, de forma a extrair essas ideias fundamentais que estruturam as relações.

Em seguida, para a obtenção da estrutura conceitual do texto, foi necessário estudar como transformar textos em redes conceituais. Nesse sentido, a definição dos conteúdos conceituais foi importante para estabelecer os conceitos relacionados ao tema; além disso, os critérios estabelecidos para a obtenção das redes foram importantes, pois, dessa maneira, garantiu-se que há coocorrência entre conceitos que estão em uma mesma frase.

O entendimento de que as redes conceituais compreendem um tipo de rede justificou o uso das métricas para analisar a estrutura conceitual obtida. Nessa etapa, trabalhou-se com a hipótese de que essas métricas seriam úteis para identificar os nós (conceitos) mais importantes. Para isso, o estudo exploratório foi importante, pois permitiu definir o significado de cada medida, e como elas se aplicam na análise de redes. Por exemplo, as medidas gerais de rede, como o diâmetro e a densidade, dão uma ideia de quão próximos estão os conceitos; as medidas de centralidade de nós utilizadas – grau, grau total e autovetor –, e a frequência, que embora não seja uma medida de análise de redes, mas de textos, foi utilizada também nestas análises, revelam quais conceitos são mais importantes em função do número de ligações que estabelecem com outros conceitos, e do peso dessas ligações. Percebeu-se que essas medidas são equivalentes e que, portanto, pode-se utilizar apenas uma delas para analisar a centralidade dos nós, sendo utilizada a centralidade de grau.

As outras medidas de centralidade estudadas foram a de proximidade e a de intermediação, que revelam o quão próximo um nó está de todos os demais nós da rede e quantas vezes ele intermedeia ligações entre pares de nós, respectivamente. A centralidade de proximidade não se mostrou útil nessa análise, por não diferenciar nenhum dos conceitos, indicando que todos estavam muito próximos. Já a centralidade de intermediação diferenciou bem os conceitos, revelando aqueles que são periféricos, ou seja, que não intermedeiam nenhuma ligação, e aqueles que são centrais. Quando aplicada junto com medidas de agrupamento de nós, como a modularidade, é possível identificar comunidades na rede e nós que unem essas comunidades. Esses *clusters* descrevem trechos do texto, enquanto as relações conceituais, por sua vez, evidenciam informações importantes relacionadas a cada contexto.

Ficou claro que a metodologia aplicada para transformar um texto em uma rede conceitual reproduziu com fidelidade esse texto em uma estrutura gráfica, na qual é possível identificar cada trecho correspondente. As métricas de análise de rede e as relações conceituais revelaram informações importantes dessa estrutura. Em especial, o destaque do conceito “molécula” indica que entender como esse conceito está relacionado com os demais no texto é importante para a compreensão do tema. Nesse contexto, a compreensão de que as propriedades moleculares estão relacionadas aos tipos de interação intermolecular evidencia uma relação conceitual central que deve ser ensinada, quando se pensa no processo de aprendizagem.

Neste momento, é importante reforçar que as medidas de centralidade, com exceção da intermediação, não diferenciaram tão bem os nós da rede a ponto de definirem um núcleo formado pelos conceitos mais centrais. Por conta disso, esse núcleo foi definido com base no primeiro quartil de conceitos, com relação ao grau. Isso se deu, provavelmente, por conta da estratégia de análise, ao utilizar a coocorrência nas frases.

As relações conceituais presentes no núcleo revelaram informações centrais para o tema, e a retirada do núcleo desfez a estrutura da rede, reforçando a importância dessa estrutura central para a integridade da rede.

De fato, o núcleo apresenta as ideias mais gerais para o tema, e isso ficou claro na análise do texto completo. Nessa etapa, obteve-se um núcleo maior, formado por mais conceitos. No entanto, a ideia central de que as interações definem as propriedades e os estados físicos, e que são fenômenos com energias típicas envolvidas, se manteve.

Por fim, o estudo das relações conceituais entre os tipos de interação intermolecular revelou as características que são comuns às interações, como a influência das propriedades moleculares e a natureza eletrostática.

Conclui-se que a metodologia aplicada neste trabalho, do uso das métricas de análise de rede associado às ideias de conteúdos conceituais, mostrou-se eficiente no levantamento da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares presente no livro didático analisado. O uso de apenas um material não permitiu uma análise mais aprofundada das métricas, mas acredita-se que essa metodologia possa ser utilizada para analisar um conjunto de textos, e, com isso, evidenciar quais são as ideias mais importantes para o conhecimento químico relacionadas às interações intermoleculares, expandindo o escopo desta pesquisa.

Com relação ao ensino, este trabalho pode contribuir com uma estratégia para a obtenção da estrutura conceitual relacionada ao tema interações intermoleculares. Nesse sentido, ela pode ser aplicada para explicitar as informações mais importantes e que são fundamentais para que o processo de aprendizagem seja mais eficiente. Além das interações intermoleculares, a aplicação dessa metodologia em outros temas do conhecimento químico, como forma de explicitar as ideias mais importantes aos alunos, pode contribuir positivamente para uma melhor compreensão dos conceitos relacionados.

REFERÊNCIAS

- ADOBE. O que é PDF? Disponível em: <<https://acrobat.adobe.com/br/pt/acrobat/about-adobe-pdf.html>>. Acesso em: 2 fev. 2020.
- ALVES, C. A.; SANTOS, S. B. S. Uma abordagem estrutural em redes: expondo padrões, possibilidades e armadilhas. **Revista de Ciências da Administração**, Florianópolis, v. 12, n. 16, p. 72-91, 2010.
- ANDERSON, R. C. Some reflections on the acquisition of knowledge. **Educational Researcher**, v. 10, n. 13, p. 5-10, 1984.
- ANTIQUEIRA, L. et al. Modelando textos como redes complexas. *In*: XXV CONGRESSO DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE COMPUTAÇÃO III WORKSHOP EM TECNOLOGIA DA INFORMAÇÃO E DA LINGUAGEM HUMANA – TIL. **Anais [...]**, p. 2089-2098. São Leopoldo, Brasil, 2005.
- ARAÚJO, A. M.; MENEZES, C. S.; CURY, D. Um ambiente integrado para apoiar a avaliação da aprendizagem baseado em mapas conceituais, *In*: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE INFORMÁTICA NA EDUCAÇÃO, 13, 2002, São Leopoldo. **Anais [...]**. São Leopoldo, 2002. p. 49-59.
- ARNABOLDI, V. et al. Ego network structure in online social networks and its impact on information diffusion. **Computer Communications**, v. 76, p. 26-41, 2016.
- ARUNAN, E., et al. Defining the hydrogen bond: an account (IUPAC technical report). **Pure and Applied Chemistry**, v. 83, n. 8, p. 1637-1641, 2011.
- ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de química**: questionando a vida moderna e o meio ambiente. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- AUSUBEL, D. P. **The acquisition and retention of knowledge**: A cognitive view. Berlin: Springer, 2000. 234 p.
- BACAS. P. Detección de las ideas del profesorado acerca de los conceptos de calor y temperatura. **Alambique**, v. 13, p. 109-116, 1997.
- BASTIAN, M.; HEYMANN, S.; JACOMY, M. Gephi. An open source software for exploring and manipulating networks. INTERNATIONAL AAAI CONFERENCE ON WEBLOGS AND SOCIAL MEDIA. **Association for the Advancement of Artificial Intelligence**, p. 1-2, 2009.
- BATOOL, K.; NIAZI, M. A. Towards a methodology for validation of centrality measures in complex networks. **PLoS ONE**, v. 9, n. 4, p. 1-14, 2014. Disponível em: <<https://journals.plos.org/plosone/article/file?id=10.1371/journal.pone.0090283&type=printable>>. Acesso em: 2 fev. 2020.
- BAVELAS, A. A mathematical model for group structure. **Applied Anthropology**, v. 7, n. 3, p. 16-30, 1948.

BAVELAS, A. Communication patterns in task orientated groups. **The Journal of the Acoustical Society of America**, v. 22, n. 6, p. 725-730, 1950.

BOAVENTURA NETTO, P. O.; JURKIEWICZ, S. **Grafos: introdução e prática**. São Paulo: Blucher, 2017. 180 p.

BOLLAND, J. M. Sorting out centrality: An analysis of the performance of four centrality models in real and simulated networks. **Social Networks**, v. 10, n. 3, p. 233–253, 1988.

BONACICH, P. Power and centrality: A family of measures. **American Journal of Sociology**, v. 92, n. 5, p. 1170–1182, 1987.

BORBA, E. M. **Medidas de centralidade em grafos e aplicações em redes de dados**. 2013. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2013.

BORGATTI, S. P. Centrality and network flow. **Social Networks**, n. 27, p. 55-71, 2005.

BORGATTI, S. P.; EVERETT, M. G. A graph-theoretic perspective on centrality. **Social Networks**, n. 28, p. 466–484, 2006.

BORGATTI, S. P.; EVERETT, M. G.; JOHNSON, J. C. **Analyzing social networks**. London: SAGE Publications, 2013. 296 p.

BOTELHO, G. M.; SOUSA, F. B. **Detecção de comunidades em redes complexas**. 2011. Trabalho de revisão bibliográfica – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

CAMARGO, B. V.; JUSTO, A. M. IRAMUTEQ: Um software gratuito para análise de dados textuais. **Temas em Psicologia**, Ribeirão Preto, v. 21, n. 2, p. 513-518, 2013.

CANATO JUNIOR, O. **Física quântica e formação docente: confluência de várias redes**. 2014. Tese (Doutorado em Ensino de Física) – Ensino de Ciências (Física, Química e Biologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

CASAS-GARCÍA, L. M.; LUENGO-GONZÁLEZ, R. The study of the pupil's cognitive structure: The concept of angle. **European Journal of Psychology of Education**, p. 1-26, 2012.

CCM. Arquivo RTF. Disponível em: <<https://br.ccm.net/contents/854-arquivo-rtf>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

CLARIANA, R. B. Deriving individual and group knowledge structure from network graphs and from essays. In: IFENTHALER, D. et al. (ed.). **Computer-Based Diagnostics and Systematic Analysis of Knowledge**. Nova Iorque: Springer, 2010. p. 117-130.

CLARIANA, R. B.; WALLACE, P. E.; GODSHALK, V. M. Deriving and measuring group knowledge structure from essays: The effects of anaphoric reference. **Education Technology Research and Development**, v. 57, n. 6, p. 725-737, 2009.

CLAUSET, A.; NEWMAN, M. E. J.; MOORE, C. Finding community structure in very large networks. **Physical Review E**, v. 70, p. 1-6, 2004.

CMAPTOOLS. Disponível em: <<http://cmap.ihmc.us/>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

COLL, C. et al. **Os conteúdos na reforma**: ensino e aprendizagem de conceitos, procedimentos e atitudes. Porto Alegre: Artmed, 2000. 182 p.

_____. **Psicologia do Ensino**. Porto Alegre: Artmed, 2000. 408 p.

COLL, C. **Marc curricular per a l'ensenyament obligatori**. Barcelona: Departament d'Ensenyament, Generalitat de Catalunya, 1986. 114 p.

COLLINS, A. M.; QUILLIAN, M. R. Retrieval time from semantic memory. **Journal of Verbal Learning and Verbal Behavior**, v. 8, n. 2, 240-247, 1969.

CORRALLO, M. V. **Atividades práticas experimentais para o ensino de Física: uma investigação utilizando a Teoria do Núcleo Central**. 2017. Tese (Doutorado em Ensino de Física) – Ensino de Ciências (Física, Química e Biologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017.

DINGLEY, A. J.; GRZESIEK, S. Direct observation of hydrogen bonds in nucleic acid base pairs by internucleotide $^2J_{NN}$ couplings. **Journal of the American Chemical Society**, v. 120, n. 33 p. 8293-8297, 1998.

DUNLAP, J. C.; GRABINGER, R. S. Using pathfinder networks to assess structural knowledge. *In*: THIRD INTERNATIONAL INTERDISCIPLINARY CONFERENCE OF THE INTERNATIONAL RESEARCH NETWORK OF TRAINING AND DEVELOPMENT CONFERENCE, 1994, Milão. **Anais eletrônicos do encontro anual**. Milão, Itália, 1994.

ESTRADA, E. **The structure of complex network**: Theory and applications. Oxford: Oxford University Press, 2011, 465 p.

FEOFILOFF, P.; KOHAYAKAWA, Y.; WAKABAYASHI, Y. Uma introdução sucinta à teoria dos grafos. Disponível em: <<http://www.ime.usp.br/~pf/teoriadosgrafos/texto/TeoriaDosGrafos.pdf>>. Acesso em: 2. fev. 2020.

FREEMAN, L. C. Centrality in social networks: Conceptual clarification. **Social Networks**, v. 1, p. 215–39, 1979.

FRIEDKIN, N. E. Theoretical foundations for centrality measures. **American Journal of Sociology**, v. 96, n. 6, p. 1478–1504, 1991.

GEPHI. Disponível em: <<https://gephi.org/>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

GIRVAN, M.; NEWMAN, M. E. J. Community structure in social and biological networks. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 99, n. 12, p. 7821-7826, 2002.

GLAZIER, S.; MARANO, N.; EISEN, L. A closer look at trends in boiling points of hydrides: Using an inquiry-based approach to teach intermolecular forces of attraction. **Journal of Chemical Education**, v. 87, n. 12, p. 1336-1341, 2010.

GÓMEZ CRESPO, M. A. Ideas y dificultades en el aprendizaje de la química. **Alambique**, v. 7, p. 37-44, 1996.

HERBST, M. H.; MONTEIRO FILHO, R. M. Um novo olhar sobre as ligações de hidrogênio. **Química Nova na Escola**, São Paulo, v. 41, n. 1, p. 10-16, 2019.

INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA. USP. Unicode e UTF-8. Disponível em: <<https://www.ime.usp.br/~pf/algoritmos/aulas/unicode.html>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

IRAMUTEQ. Interface de R pour les Analyses Multidimensionnelles de Textes et de Questionnaires. Disponível em: <<http://www.iramuteq.org>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

IUPAC. Goldbook. MCNAUGHT, A. D.; WILKINSON, A. (Comp.) **Compendium of Chemical Terminology** 2. ed. Oxford: Blackwell Scientific Publications, 1997.

JAIN, A. K.; DUBES, R. C. **Algorithms for clustering data**. New Jersey: Prentice Hall, 1988. 320 p.

JASIEN, P. G. Helping students assess the relative importance of different intermolecular interactions. **Journal of Chemical Education**, v. 85 n. 9, p. 1222-1225, 2008.

JUNQUEIRA, M. M. **Transformando textos em mapas cognitivos: desenvolvimento e um exemplo de aplicação**. 2013. Dissertação (Mestrado em Ensino de Química) – Ensino de Ciências (Física, Química e Biologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

JUNQUEIRA, M. M. **Um estudo sobre o tema interações intermoleculares no contexto da disciplina de química geral: a necessidade da superação de uma abordagem classificatória para uma abordagem molecular**. 2017. Tese (Doutorado em Ensino de Química) – Ensino de Ciências (Física, Química e Biologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017.

KOPONEN, I. T.; PEHKONEN, M. Coherent knowledge structures of physics represented as concept networks in teacher education. **Science Education**, v. 19, n. 3, 259-282, 2010.

LAHLOU, S. L'analyse lexicale. **Variances**, v. 3, p. 13-24, 1994.

_____. Text mining methods: An answer to Chartier and Meunier. **Papers on Social Representations**, v. 20, n. 38, p. 1-7, 2012.

LANGACKER, R. W. Consciousness, construal and subjectivity. In: STAMENOW, M. I. (ed.) **Language structure, discourse and the access to consciousness**. Amsterdam: John Benjamins, 1997. 375 p.

LEAVITT, H. J. Some effects of certain communication patterns on group performance. **The Journal of Abdominal and Social Psychology**, v. 46, n. 1, p. 38-50, 1951.

LEE, C. Y. Correlations among centrality measures in complex networks. **Physics and Society**, v. 1, p. 1-18, 2008. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/physics/0605220.pdf>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

LÉVY, P. **As tecnologias da inteligência**: o futuro do pensamento na era da informática. Rio de Janeiro: Editora 34, 1993. 208 p.

LIMA, H. S.; MARQUES-NETO, H. T. Utilizando métricas de ego-network para validação de atributos dos perfis de usuários de redes sociais on-line. *In*: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE REDES DE COMPUTADORES E SISTEMAS DISTRIBUÍDOS (SBRC), 36, 2018, Campos do Jordão. **Anais do XXXVI Simpósio Brasileiro de Redes de Computadores e Sistemas Distribuídos**. Porto Alegre: Sociedade Brasileira de Computação, 2018.

LINKEDIN. Entenda o que é a tecnologia OCR e como ela pode ajudar a sua empresa, 2015. Disponível em: <<https://pt.linkedin.com/pulse/entenda-o-que-%C3%A9-tecnologia-ocr-e-como-ela-pode-ajudar-caroline>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

LOMASK, M., et al. ConnMap: Connecticut's use of concept mapping to assess the structure of student's knowledge of science. *In*: **Annual Meeting of the National Association of Research in Science Teaching**. Cambridge, 1992.

LOPES, A. R. C. A concepção de fenômeno no Ensino de Química brasileiro através dos livros didáticos. **Química Nova**, São Paulo v. 17, n. 4, p. 334-338, 1994.

MACHADO, N. J. Conhecimento como rede: a metáfora como paradigma e como processo. *In*: _____. **Epistemologia e didática**: as concepções de conhecimento e inteligência e a prática docente. São Paulo: Cortez, 2011. 303 p.

MARCHAND, P.; RATINAUD, P. L'analyse de similitude appliquée aux corpus textuelles: les primaires socialistes pour l'élection présidentielle française. *In*: JOURNEES INTERNATIONALES D'ANALYSE STATISTIQUE DES DONNEES TEXTUELLES, 11, 2012, Liège. **Actes [...]**. Liège: JADT, p. 687-699, 2012.

MARSLEN, W. W. Functional parallelism in spoken word recognition. **Cognition**, v. 25, n. 1, p. 71-102, 1987.

MAXIMIANO, F. A.; SILVA, P. A. A utilização de uma metodologia que transforma textos em mapas e redes conceituais no estudo da compreensão do tema química verde por alunos de um curso de graduação em química. *In*: IX CONGRESO INTERNACIONAL SOBRE INVESTIGACIÓN DE LAS CIENCIAS. Barcelona: Universitat Autònoma de Barcelona, 2013. v. extra. p. 2225-2232.

MICHAELIS. Dicionário Brasileiro da Língua Portuguesa. Disponível em: <<http://michaelis.uol.com.br/moderno-portugues/>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

MILLER, G. A. **The science of words**. Hampshire: W H Freeman & Co., 1991. 276 p.

MOREIRA, M. A. Conceptos en la educación científica: ignorados y subestimados. **Qurrriculum**, n. 21, p. 9-26, 2008.

NEWMAN, M. E. J. Fast algorithm for detecting community structure in networks. **Physical Review E**, v. 69, n. 6, p. 1-5, 2004.

_____. Finding community structure in networks using the eigenvectors of matrices. **Physical Review E**, v. 74, p. 1-22, 2006.

_____. **Networks**: An introduction. Oxford: Oxford University Press, 2010. 1042 p.

NOVAK, J. D.; CAÑAS, A. J. Theoretical origins of concept maps, how to construct them, and uses in education. **Reflecting Education**, v. 3, n. 1, p. 29-42, 2007.

NOVAK, J. D.; GOWIN, D. B. **Learning how to learn**. Nova Iorque: Cambridge University Press, 1984. 199 p.

OKADA, A. **Cartografia Investigativa – Interfaces epistemológicas comunicacionais para mapear conhecimento em projetos de pesquisa**. 2006. Tese (Doutorado em Educação: Currículo) – Pontifícia Universidade Católica, São Paulo, 2006.

PAPPA, E. T.; TSAPARLIS, G. Evaluation of questions in general chemistry textbooks according to the form of the questions and the question-answer relationship (QAR): The case of intra- and intermolecular chemical bonding. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 12, p. 262-270, 2011.

PARANYUSHKIN, D. Identifying the pathways for meaning circulation using text network analysis. **Nodus Labs**, p. 1-26, 2011.

PAST 4 – The Past of the Future. Disponível em: <<https://folk.uio.no/ohammer/past/>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

POZO, J. I. A aprendizagem e o ensino de fatos e conceitos. *In*: COLL, C. et al. **Os conteúdos na reforma**: ensino e aprendizagem de conceitos, procedimentos e atitudes. Porto Alegre: Artmed, 2000. 182 p.

_____. Aprendizaje de contenidos y desarrollo de capacidades en la Educación Secundaria. *In*: COLL, C. (ed.) **Psicología de la instrucción**: la enseñanza y el aprendizaje en la Educación Secundaria. Barcelona: Horsori, 1999a. 210 p.

POZO, J. I.; CRESPO, M. A. **Aprendizagem e o ensino de ciências**. São Paulo: Editora Artmed. 5ª Edição. 2009.

POZO, J. I.; GÓMEZ CRESPO, M. A. Cambio conceptual en Química. **Memoria de investigación no publicada**. Facultad de Psicología de la Universidad Autónoma de Madrid, 1997a.

_____. ¿Qué es lo que hace difícil la comprensión de la ciencia? Algunas explicaciones y propuestas para la enseñanza. *In*: CARMEN, L. (ed.) **Cuadernos de Formación del Profesorado de Educación Secundaria: Ciencias de la Naturaleza**. Barcelona: Horsori, 1997b. 224 p.

POZO, J. I.; GÓMEZ CRESPO, M. A.; SANZ, A. La comprensión de la química en la adolescencia. **Memoria de Investigación no publicada**. Facultad de Psicología de La Universidad Autónoma de Madrid, 1993.

PYTHON. Disponível em: <<https://www.python.org>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

RATINAUD, P.; MARCHAND, P. Application de la méthode Alceste aux “gros” corpus et stabilité des “mondes lexicaux”: analyse du “Cable Gate” avec Iramuteq. *In*: JOURNEES INTERNATIONALES D’ANALYSE STATISTIQUE DES DONNEES TEXTUELLES, 11, 2012, Liège. **Actes** [...]. Liège: JADT, p. 835-844, 2012.

REEVES, C. **The language of science**. Abingdon: Routledge, 2005. 128 p.

REIS, A. S. **Ligações hidrogênio no cotidiano** – uma contribuição para o ensino de química. 2008. Dissertação (Mestrado em Química) – Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

REVIVER SOFT. O que é um .txt arquivo? Disponível em: <<https://www.reviversoft.com/pt/file-extensions/txt>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

ROCHA, W. R. Interações intermoleculares. **Cadernos temáticos de Química Nova na Escola**, São Paulo, n. 4, p. 31-36, 2001.

ROTHENBERG, R. B. et al. Choosing a centrality measure: Epidemiologic correlates in the colorado springs study of social networks. **Social Networks**, v. 17, n. 3, p. 273-297, 1995.

RUIZ-PRIMO, M. A.; SHAVELSON, R. J. Problems and issues in the use of concept maps in science assessment. **Journal of Research in Science Teaching**. v. 33, n. 6, p. 569-600, 1996.

RYAN, P. D. et al. **PALSTAT, statistics for paleontologists**. Chapman & Hall, 1995.

SCHMIDT, H. J.; KAUFMANN, B.; TREAGUST, D. F. Students’ understanding of boiling points and intermolecular forces. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 10, p. 265-272, 2009.

SCHOCH, D. et al. Correlations among centrality indices and a class of uniquely ranked graphs. **Social Networks**, v. 50, p. 46-54, 2017.

SCHVANEVELDT, R. W.; DEARHOLT, D. W.; DURSO, F. T Network structures in proximity data. **The Psychology of Learning and Motivation**, v.24, p. 249-284. 1989.

SHAVELSON, R. J.; RUIZ-PRIMO, M. A.; WILEY, E. W. Windows into the mind. **Higher Education**, v. 49, p. 413-430, 2005.

SILVA, C. S. et al. Questões de Química no Concurso Vestibular da Unesp: Desempenho dos Estudantes e Conceitos Exigidos nas Provas. **Química Nova na Escola**, São Paulo, v. 32, n. 1, p. 14-21, 2010.

SMITH, M., et al. Analyzing (social media) networks with NodeXL. **Proceedings of the fourth international conference on communities and technologies**. Berlin: Springer, 2009.

STAY, R. Conceptual development of basic ideas in Chemistry. *In*: GLYNN, S. M.; DUIT, R. (ed.) **Learning science in schools**. Hillsdale: Earlbaum, 1995, 392 p.

STEELS, L. The emergence and evolution of linguistic structure: from lexical to grammatical communication systems. **Connection Science**, v. 17, n. 3, p. 213-230, p. 2005.

TARHAN, L. et al. Problem-Based Learning in 9th Grade Chemistry Class: "Intermolecular Forces". **Research Science Education**, v. 38, p. 285-300, 2008.

THE R PROJECT for statistical computing. Disponível em: <<https://www.r-project.org>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

TOIGO, A. M.; MOREIRA, M. A. Relatos de experiência sobre o uso de mapas conceituais como instrumento de avaliação em três disciplinas do curso de Educação Física. **Experiências em Ensino de Ciências**, Cuiabá, v. 3, n. 2, p. 7-20, 2008.

VALENTE, T. W. et al. How correlated are network centrality measures? **Connections**, v. 28, n. 1, p. 16-26, 2008. Disponível em: <<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2875682/pdf/nihms80042.pdf>>. Acesso em: 2 fev. 2020.

WASSERMAN, S.; FAUST, K. **Social network analysis: Methods and applications**. Cambridge, MA: Cambridge University Press, 1994, 857 p.

WEINHOLD, F.; KLEIN, R. A. What is a hydrogen bond? Resonance covalency in the supramolecular domain. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, n. 3, p. 276-285, 2014.

WELLINGTON, J.; OSBORNE, J. **Language and literacy in science education**. Buckingham: Open University Press, 2001. 160 p.

YUN, E.; PARK, Y. Extraction of scientific semantic networks from science textbooks and comparison with science teachers' spoken language by text network analysis. **International Journal of Science Education**, v. 40, n. 17, p. 2118-2136, 2018.

ZHANG, J. et al. Real-space identification of intermolecular bonding with atomic force microscopy. **Science**, v. 342, n. 6158, p. 611-614, 2013.

APÊNDICE A – Texto completo preparado para rodar no Iramuteq

**** *Atkins_completo

Líquidos e sólidos.

Quais são as ideias importantes?

As fases condensadas da matéria são uma consequência da ação das forças intermoleculares. Quando os átomos, íons e moléculas não têm energia suficiente para escapar da influência de seus vizinhos, eles formam sólidos com arranjos característicos.

Os líquidos se formam quando os átomos podem se mover em relação a seus vizinhos, mas não escapam completamente de sua influência.

Por que precisamos estudar este assunto?

Os materiais do futuro serão formulados com base na compreensão de como o arranjo de seus átomos e moléculas determinam as suas propriedades físicas.

Os cientistas entendem e inventam novos materiais levando em conta as propriedades atômicas e propriedades moleculares e interações intermoleculares e como elas influenciam suas propriedades físicas.

Este capítulo continua a importante tarefa, iniciada no Capítulo 4, de relacionar as propriedades atômicas e propriedades moleculares às propriedades físicas e à estrutura da matéria.

O que devemos saber para entender o capítulo?

Este capítulo usa os conceitos de energia potencial (Seção A), interações coulômbicas (Seção 3_3) e forças intermoleculares nos gases (Seção 4_15).

As moléculas se atraem.

Deste fato simples, surgem importantes consequências.

Rios, lagos e oceanos existem porque as moléculas se atraem e formam um líquido.

Sem esse líquido, não haveria vida.

Sem as forças entre as moléculas, nossa carne se separaria dos ossos e os oceanos virariam gás.

Dizendo de forma menos dramática, as forças entre as moléculas governam as propriedades físicas da matéria e contribuem para explicar as diferenças entre as substâncias que estão à nossa volta.

Elas explicam por que o dióxido de carbono é um gás que exalamos, por que a madeira é um sólido sobre o qual podemos ficar em pé e por que o gelo flutua na água.

Quando muito próximas, as moléculas também se repelem.

Ao entrar em contato, resistem à compressão.

É por isso que as moléculas têm volume definido e não podem ser esmagadas até volume 0.

Tratamos, no Capítulo 4, dos gases, nos quais as forças intermoleculares têm um papel muito pequeno.

Aqui, veremos os líquidos e sólidos, nos quais as forças responsáveis pela agregação são de importância crucial para a determinação das propriedades físicas do conjunto de moléculas.

Uma molécula isolada de água, por exemplo, não é úmida, mas uma coleção de moléculas de água o é, porque as moléculas se atraem umas às outras e atraem outras substâncias. Uma molécula isolada de água não congela nem ferve, mas uma coleção delas sim, porque no processo de congelamento as moléculas ficam juntas e durante a ebulição elas se separam.

Temos de refinar nosso modelo atômico e molecular da matéria para ver como propriedades como tamanho, forma e polaridade podem ser interpretadas em termos das propriedades moleculares de moléculas isoladas.

Começamos este capítulo pela exploração das forças intermoleculares, isto é, as forças entre moléculas, que são diferentes das forças responsáveis pela formação das ligações entre átomos (as ligações entre átomos são consequência das forças intramoleculares).

Depois, veremos as propriedades físicas dos líquidos e as estruturas e propriedades físicas dos sólidos.

Neste capítulo, encontraremos estruturas sólidas progressivamente mais complexas, mas as relações entre as estruturas e as propriedades físicas seguem sempre os mesmos princípios gerais.

Forças_intermoleculares.

O estado_físico da matéria mais simples é o gás.

Podemos entender muitas das propriedades_físicas de um gás, a pressão, por exemplo, em termos do modelo cinético descrito no Capítulo 4, no qual as moléculas não interagem entre si, exceto durante colisões.

Vimos, também, que o modelo pode ser melhorado e usado para explicar as propriedades_físicas dos gases reais, levando em conta a atração e a repulsão das moléculas.

Mas qual é a origem das forças_de_atração e forças_de_repulsão?

Qual é sua relação com as propriedades_moleculares?

Essas são algumas das questões que discutiremos nas próximas cinco seções.

Formação de fases_condensadas.

As forças_intermoleculares são responsáveis pela existência das várias diferentes fases da matéria.

Uma fase é uma forma da matéria que tem composição_química e estado_físico uniforme.

As fases da matéria incluem os três estado_físico comuns, sólido, líquido e gás (ou vapor), que vimos na seção A.

Vapor significa, usualmente, que uma substância que é um líquido ou um sólido, em condições normais, está na fase gás.

Muitas substâncias têm mais de uma fase sólida, com arranjos diferentes dos átomos ou das moléculas.

Por exemplo, o carbono tem várias fases sólidas, sendo uma delas o diamante e outra a grafita.

Uma fase condensada significa simplesmente uma fase sólida ou líquida.

A temperatura na qual um gás se condensa para formar um líquido ou um sólido depende da pressão e da intensidade das forças_de_atração entre as moléculas.

As Seções 5_2 a 5_5 descrevem as origens de algumas das interações mais importantes entre as moléculas.

A Tabela 5_1 resume essas interações e compara suas energias com as energias típicas das ligações_iônicas, que são muito mais fortes do que quaisquer interações_intermoleculares. E, para podermos falar de todos os líquidos, soluções e líquidos puros, descreveremos também as forças que agem quando íons estão presentes em um líquido molecular como a água. Tabela 5_1 Forças_interiônicas e forças_intermoleculares.

A interação total experimentada por uma espécie é a soma de todas as interações das quais ela participa.

Tipo de interação: íon_íon; energia típica: 250 kJ/mol; espécies que interagem: somente íons.

Tipo de interação: íon_dipolo; energia típica: 15 kJ/mol; espécies que interagem: íons e moléculas polares.

Tipo de interação: dipolo_dipolo; energia típica: 2 kJ/mol; espécies que interagem: moléculas polares estacionárias.

Tipo de interação: dipolo_dipolo; energia típica: 0,3 kJ/mol; espécies que interagem: moléculas polares em rotação.

Tipo de interação: dipolo_dipolo_induzido; energia típica: 2 kJ/mol; espécies que interagem: pelo menos uma molécula deve ser polar.

Tipo de interação: forças_de_London (dispersão), também conhecido como interação dipolo_induzido_dipolo_induzido; energia típica: 2 kJ/mol; espécies que interagem: todos os tipos de moléculas.

Tipo de interação: ligação_hidrogênio; energia típica: 20 kJ/mol; espécies que interagem: moléculas que contêm nitrogênio, oxigênio, flúor; a ligação é um hidrogênio compartilhado.

Todas as forças_interiônicas e quase todas as interações_intermoleculares podem ser atribuídas, em grande parte, às interações_coulômbicas entre duas carga_elétrica (Seção 2_2) e neste capítulo utilizaremos muito a expressão da energia_potencial, E_p , entre duas carga_elétrica, q_1 e q_2 , separadas por uma distância r .

A energia_potencial é igual ao produto entre as carga_elétrica q_1 e q_2 dividido pelo produto entre uma constante e a distância r que separa essas carga_elétrica.

Essa expressão foi vista na Seção A.

A Figura 5_1 mostra a dependência dessa energia_potencial e de outras interações, descritas nas próximas seções.

Figura 5_1 Dependência da energia_potencial com a distância de interação entre íons (em vermelho), íons e dipolos (em marrom), dipolos estacionários (em verde) e dipolos em rotação (em azul).

Quando forças_de_atração juntam moléculas, se formam fases condensadas.

Forças íon_dipolo.

Um íon em água tem um certo número de moléculas de água a ele ligadas.

A ligação de moléculas de água a partículas solúveis, especialmente íons, é chamada de hidratação.

Para outros solventes que não a água, o processo análogo é chamado de solvatação.

A hidratação é devida ao caráter polar da molécula de água.

A carga_parcial negativa do átomo de oxigênio é atraída pelo cátion e as carga_parcial positivas dos átomos de hidrogênio são repelidas.

Se espera, por isso, que moléculas de água se aglomerem ao redor do cátion, com os átomos de oxigênio apontando para o interior e os átomos de hidrogênio apontando para o exterior (Fig 5_2a).

Se espera o arranjo inverso no caso de um ânion: os átomos de hidrogênio têm carga_parcial positivas; logo, eles são atraídos pela carga_elétrica negativa do ânion (Fig 5_2b).

Como a hidratação é o resultado da interação entre o íon e as carga_parcial da molécula polar de água, este é um exemplo de uma interação íon_dipolo.

Figura 5_2 Os íons, em água, estão hidratados.

(a) Um cátion está rodeado por moléculas de água com os átomos de oxigênio próximos do íon.

(b) Um ânion está rodeado de moléculas de água que dirigem seus átomos de hidrogênio para o íon.

Essa interação é característica de íons dissolvidos em solventes polares, como a água e a amônia líquida.

A energia_potencial da interação entre a carga_elétrica máxima de um íon e as duas carga_parcial de uma molécula polar é dada por.

Energia_potencial é proporcional ao produto entre o módulo de z por m_i , e inversamente proporcional à distância r elevada ao quadrado, em que z é a carga_elétrica do íon e m_i é o momento_de_dipolo elétrico da molécula polar.

O sinal negativo significa que a energia_potencial do íon é diminuída pela interação com o solvente polar.

A dependência do inverso da distância elevada ao quadrado significa que a interação entre o íon e o dipolo depende mais fortemente da distância do que a interação entre dois íons, que é proporcional ao inverso da distância r (veja a Fig 5_1) e, portanto, tem alcance menor.

Como resultado, as moléculas polares têm de estar muito próximas de um íon, quase em contato, para que a interação seja significativa.

Mesmo quando a molécula e o íon estão muito próximos, as interações íon_dipolo são ainda muito mais fracas do que a atração entre dois íons, porque a molécula polar tem somente carga_parcial.

Além disso, um íon atraído pela carga_parcial de um lado da molécula é repelido pela carga_parcial oposta do outro lado.

Quando os sais se cristalizam a partir de uma solução em água, os íons podem reter algumas das moléculas de água de hidratação e formar hidratos como $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ e $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, por exemplo.

O tamanho do íon e sua carga_elétrica controlam a extensão da hidratação.

A energia de interação íon_dipolo é maior quando o valor da distância r na Eq2 é pequeno (isto é, quando o dipolo está mais próximo do centro do íon).

Por causa das interações íon_dipolo mais fortes, os cátions pequenos atraem as moléculas polares de água mais fortemente do que os cátions maiores e, como resultado, os cátions pequenos são hidratados mais extensamente.

De fato, o lítio e o sódio normalmente formam sais hidratados; entretanto, os elementos mais pesados do Grupo 1, que têm cátions maiores, potássio, rubídio e cério, não.

Os sais de amônio são normalmente anidros, isto é, livres de água, por uma razão semelhante: um íon NH_4^+ tem aproximadamente o mesmo raio (143pm) de um íon Rb^+ (149pm). Podemos ver o efeito da carga_elétrica na extensão da hidratação ao comparar os cátions de bário e de potássio, que têm raios semelhantes (136pm para Ba^{2+} e 138pm para K^+).

Os sais de potássio não são hidratados apreciavelmente, mas os sais de bário, ao contrário, são frequentemente hidratados.

Por exemplo, o cloreto de bário é encontrado como $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, mas o cloreto de potássio é anidro.

A diferença está ligada à maior carga elétrica do íon bário.

O lantânio, vizinho do bário, é menor (122pm) e tem carga elétrica maior (La^{3+}), e podemos esperar que ele exerça interações íon-dipolo fortes e que seus compostos sejam extensivamente hidratados.

De fato, seus sais incluem $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ e $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$.

As interações íon-dipolo são fortes para íons pequenos com carga elétrica elevada. Em consequência, os cátions pequenos com carga elétrica elevada formam, frequentemente, compostos hidratados.

Forças dipolo-dipolo.

Agora imagine o que nós veríamos se pudéssemos observar uma molécula polar cercada por outras moléculas polares em um sólido.

Um exemplo de molécula polar é o clorometano, CH_3Cl , com carga parcial negativa no átomo de cloro e carga parcial positiva espalhada pelos átomos de hidrogênio.

Quando as moléculas estão no sólido, a carga parcial negativa de um átomo de cloro de uma molécula é atraída pela carga parcial positiva dos átomos de hidrogênio de uma molécula vizinha e repelida pela carga parcial negativa.

Em consequência, esperaríamos ver as moléculas alinhadas o máximo possível, com as carga parcial opostas de moléculas vizinhas ficando o mais perto possível (Fig 5_3). Figura 5_3 As moléculas polares atraem umas às outras por interação entre as carga parcial de seus dipolos elétricos (representados pelas setas).

As orientações relativas mostradas aqui (enfileiradas ou lado a lado) resultam em energia mais baixa.

A interação entre dipolos é chamada de interação dipolo-dipolo, e a energia potencial resultante é.

Energia potencial é proporcional ao produto de m_1 por m_2 , e inversamente proporcional à distância r elevado ao cubo.

Essa expressão é baseada na Eq1, mas leva em conta as interações entre todas as quatro carga parcial das duas moléculas.

Aqui, m_1 e m_2 são os momento de dipolo das moléculas que interagem (para um sólido cujas moléculas são idênticas, m_1 é igual a m_2).

Quanto maior for a polaridade das moléculas, mais forte serão as interações.

A Eq3 mostra também que, quando a distância entre as moléculas dobra, a energia das interações diminui pelo fator 2 elevado ao cubo, que é igual a 8.

Essa forte dependência da distância significa que a energia potencial cai muito mais rapidamente do que as energias das interações íon-íon ou íon-dipolo (veja a Fig 5_1). Uma razão para a fraqueza dessas interações é que as carga parcial dos dipolos não são completas.

Imagine, agora, que podemos observar a mesma molécula de clorometano na fase gás.

A molécula e seus vizinhos rodam muito rapidamente (Fig 5_4).

Figura 5_4 Uma molécula polar que roda nas proximidades de outra molécula polar passa mais tempo na orientação de menor energia (sombreado), que favorece as atrações; logo, a interação resultante é atrativa, porém menos do que se as moléculas não estivessem rodando.

Leva em torno de 1ps para uma molécula fazer uma revolução completa na fase gás.

Para que a rotação seja perfeitamente livre, as atrações entre as carga parcial opostas e as repulsões entre as carga parcial de mesmo sinal se cancelam e não existe interação.

No entanto, na realidade, os vizinhos que estão rodando ficam retidos brevemente nas orientações mais energeticamente favoráveis (com as carga parcial de sinais opostos adjacentes), isto é, as interações atrativas entre carga parcial opostas predominam ligeiramente sobre as interações repulsivas entre carga parcial de mesmo sinal.

Isso significa que existe uma pequena atração residual entre moléculas polares que estão em rotação na fase gás.

O resultado é que a energia potencial varia com a sexta potência da distância entre as moléculas (veja a Fig 5_1).

Energia_potencial é proporcional ao produto dos momento_de_dipolo elétrico das duas moléculas polares, ambos elevados ao quadrado, e inversamente proporcional à distância r elevada a sexta potência entre as duas moléculas polares.

Quando a separação das moléculas polares dobra, a energia de interação se reduz por um fator de 2 elevado a sexta potência, que é igual a 64, o que significa que as interações dipolo_dipolo entre moléculas em rotação são importantes somente quando as moléculas estão muito próximas.

Começamos a entender por que o modelo cinético dos gases explica tão bem as propriedades_físicas dos gases.

As moléculas na fase gás estão em rotação livre e, na maior parte do tempo, estão muito separadas, de forma que quaisquer interações_intermoleculares entre elas são muito fracas.

Como a energia_potencial contribui muito pouco para a energia total do gás, um modelo que só inclui a energia_cinética é uma boa primeira aproximação das propriedades_físicas dos gases.

A Equação 4 descreve também a atração entre moléculas que estão em rotação em um líquido. No entanto, na fase líquida, as moléculas estão muito mais próximas e a interação é muito maior do que na fase gás e, portanto, as interações dipolo_dipolo são muito mais fortes.

As moléculas polares participam de interações dipolo_dipolo, que decorrem da atração entre as carga_parcial de suas moléculas.

As interações dipolo_dipolo são mais fracas do que as forças entre íons e caem rapidamente com a distância, especialmente nas fases líquida e gás, em que as moléculas estão em rotação.

Exemplo 5_1 Predição dos ponto_de_ebulição relativos na base das interações dipolo_dipolo.

Que composto terá o ponto_de_ebulição mais alto, o p_diclorobenzeno ou o o_diclorobenzeno? Estratégia Quando dois compostos têm momento_de_dipolo diferentes, mas são muito semelhantes no resto, se espera que as moléculas que têm o maior momento_de_dipolo elétrico interajam mais fortemente.

Portanto, atribua o ponto_de_ebulição mais alto ao composto mais polar.

Para decidir se uma molécula é polar, verifique se os momento_de_dipolo das ligações se cancelam ou não, como foi explicado na Seção 3_3.

Solução As duas ligações CCl do p_diclorobenzeno ficam em posição exatamente opostas no anel e seus momento_de_dipolo se cancelam, produzindo uma molécula apolar.

A molécula de o_diclorobenzeno é polar porque os dipolos das duas ligações CCl não se cancelam.

Portanto, se pode prever um ponto_de_ebulição mais alto para o o_diclorobenzeno do que para o p_diclorobenzeno.

Os valores experimentais são 180°C, para o o_diclorobenzeno, e 174°C, para o p_diclorobenzeno.

Teste 5_1A Que composto terá o ponto_de_ebulição mais alto, o cis_dicloroetano ou o trans_dicloroetano?

[Resposta: cis_dicloroetano].

Teste 5_1B Que composto terá o ponto_de_ebulição mais alto, o 1_1_dicloroetano ou o trans_dicloroetano?

Forças_de_London.

Uma evidência da existência de interações atrativas entre moléculas apolares é que os gases nobres, que, por serem monoatômicos, são necessariamente apolares, podem ser liquefeitos.

Além disso, muitos compostos apolares, como os hidrocarbonetos que formam a gasolina, são líquidos.

À primeira vista, parece não existir um mecanismo de atração entre moléculas apolares.

Para encontrar a explicação para essas propriedades_atômicas e propriedades_moleculares é necessário refinar nosso modelo de distribuição_eletrônica de uma molécula.

Em primeiro lugar, é preciso lembrar que todas as representações da distribuição_eletrônica e das carga_elétrica nos desenhos computadorizados que vimos (estruturas 1 e 2, por exemplo) são valores médios.

De fato, em um determinado instante, as nuvem_de_elétrons de átomos e moléculas não são uniformes.

Se pudéssemos fazer uma fotografia instantânea de uma molécula, a distribuição_eletrônica pareceria com a neblina em movimento.

Os elétrons podem se concentrar em algum ponto da molécula, deixando o núcleo parcialmente exposto.

Como resultado, uma região da molécula adquire uma carga_parcial negativa instantânea e, a outra região, uma carga_parcial positiva instantânea.

Até mesmo uma molécula apolar pode ter um momento_de_dipolo instantâneo (Fig 5_5).

Figura 5_5 A flutuação da distribuição_eletrônica em duas moléculas vizinhas resulta em dois momento_de_dipolo elétrico instantâneos que provocam atração.

As flutuações variam, mas cada novo arranjo de uma molécula induz um arranjo na outra que mantém a atração mútua.

Um momento_de_dipolo instantâneo em uma molécula distorce a nuvem_de_elétrons de uma molécula vizinha e dá origem a um momento_de_dipolo na segunda molécula: os dois dipolos se atraem.

No momento seguinte, a nuvem_de_elétrons da primeira molécula se altera e dá origem a um momento_de_dipolo em uma direção diferente que, por sua vez, induz um momento_de_dipolo na segunda molécula, e as duas moléculas ainda se atraem.

Isso significa que, embora o momento_de_dipolo instantâneo de uma molécula possa variar de uma orientação a outra, o momento_de_dipolo induzido na segunda molécula o segue fielmente e, em decorrência, existe atração permanente entre as duas moléculas.

Essa interação é chamada de forças_de_London.

Ela age entre todas as moléculas e é a única força que age entre as moléculas apolares. Fritz_London foi o físico alemão, naturalizado norte americano, que primeiro explicou a força.

A forças_de_London é também chamada de interação de dispersão.

Ela é também conhecida como forças_de_London, mas força e energia_potencial têm uma dependência diferente da distância (veja o Exercício 5_21).

A energia das forças_de_London depende da polarizabilidade, α (alfa), das moléculas, isto é, da facilidade de deformação das nuvem_de_elétrons.

Como o núcleo das moléculas muito polarizáveis tem pouco controle sobre os elétrons circundantes, a densidade_de_elétrons pode flutuar muito e, portanto, carga_parcial instantâneas elevadas se produzem.

Cálculos detalhados mostraram que a energia_potencial das forças_de_London varia com o inverso da sexta potência da separação entre duas moléculas.

Energia_potencial é diretamente proporcional ao produto da polarizabilidade α_1 pela polarizabilidade α_2 das duas moléculas, e inversamente proporcional à distância r elevada à sexta potência.

Como a energia_potencial das interações dipolo-dipolo entre moléculas em rotação, a energia_potencial das forças_de_London também diminui rapidamente com a distância (como 1 sobre r elevado a sexta potência, veja a Fig 5_1).

A energia_potencial da interação aumenta com a polarizabilidade das moléculas que interagem.

Como as moléculas volumosas, que têm muitos elétrons, são mais polarizáveis do que as moléculas pequenas com poucos elétrons, se pode esperar que elas sofram forças_de_London mais fortes do que as menores (Fig 5_6).

Figura 5_6 Estes hidrocarbonetos mostram como as intensidades das forças_de_London aumentam com a massa_molar.

O pentano é um fluido móvel (à esquerda); o pentadecano, $C_{15}H_{32}$, é um líquido viscoso (no centro); e o octadecano, $C_{18}H_{38}$, é uma cera sólida (à direita).

Até certo ponto, o aumento das forças_intermoleculares é favorecido pela capacidade que as moléculas de cadeia longa têm de se enrolar umas nas outras.

A correlação entre o número de elétrons e a intensidade das forças_de_London explica muitas propriedades_físicas.

Assim, a molécula H_2 só tem dois elétrons e sua interação com outras moléculas H_2 deve ser muito fraca.

De fato, o gás hidrogênio, em 1atm, só passa a líquido se a temperatura for igual a 20K (menos 253°C).

Agora podemos ver por que os halogênios menores são gases (F₂ e Cl₂) e, os maiores, um líquido (Br₂) e um sólido (I₂) na temperatura normal.

É porque o número de elétrons das moléculas cresce e as forças_de_London aumentam descendo no grupo.

A energia das forças_de_London aumenta de forma surpreendente quando os átomos de hidrogênio são substituídos por átomos mais pesados.

O metano ferve em menos_161°C, mas o tetraclorometano (tetracloreto de carbono, CCl₄) tem um número muito maior de elétrons e é um líquido, com ponto_de_ebulição a 77°C.

O tetrabromometano, CBr₄, tem um número ainda maior de elétrons e é um sólido em temperatura normal (Tabela 5_2).

Tabela 5_2 Ponto_de_fusão e ponto_de_ebulição de substâncias.

Substância; Gases nobres: He; Ponto_de_fusão (°C): menos_270 (3,5K), sob pressão; Ponto_de_ebulição (°C): menos_269 (4,2K).

Substância; Gases nobres: Ne; Ponto_de_fusão (°C): menos_249; Ponto_de_ebulição (°C): menos_246.

Substância; Gases nobres: Ar; Ponto_de_fusão (°C): menos_189; Ponto_de_ebulição (°C): menos_186.

Substância; Gases nobres: Kr; Ponto_de_fusão (°C): menos_157; Ponto_de_ebulição (°C): menos_153.

Substância; Gases nobres: Xe; Ponto_de_fusão (°C): menos_112; Ponto_de_ebulição (°C): menos_108.

Substância; Halogênios: F₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_220; Ponto_de_ebulição (°C): menos_188.

Substância; Halogênios: Cl₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_101; Ponto_de_ebulição (°C): menos_34.

Substância; Halogênios: Br₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_7; Ponto_de_ebulição (°C): 59.

Substância; Halogênios: I₂; Ponto_de_fusão (°C): 114; Ponto_de_ebulição (°C): 184.

Substância; Halogenetos de hidrogênio: HF; Ponto_de_fusão (°C): menos_93; Ponto_de_ebulição (°C): 20.

Substância; Halogenetos de hidrogênio: HCl; Ponto_de_fusão (°C): menos_114; Ponto_de_ebulição (°C): menos_85.

Substância; Halogenetos de hidrogênio: HBr; Ponto_de_fusão (°C): menos_89; Ponto_de_ebulição (°C): menos_67.

Substância; Halogenetos de hidrogênio: HI; Ponto_de_fusão (°C): menos_51; Ponto_de_ebulição (°C): menos_35.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: H₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_259; Ponto_de_ebulição (°C): menos_253.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: N₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_210; Ponto_de_ebulição (°C): menos_196.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: O₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_218; Ponto_de_ebulição (°C): menos_183.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: água; Ponto_de_fusão (°C): 0; Ponto_de_ebulição (°C): 100.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: H₂S; Ponto_de_fusão (°C): menos_86; Ponto_de_ebulição (°C): menos_60.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: NH₃; Ponto_de_fusão (°C): menos_78; Ponto_de_ebulição (°C): menos_33.

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: CO₂; Ponto_de_fusão (°C): (sem valor); Ponto_de_ebulição (°C): menos_78 (o sólido sublima).

Substância; Espécies inorgânicas pequenas: SO₂; Ponto_de_fusão (°C): menos_76; Ponto_de_ebulição (°C): menos_10.

Substância; Compostos orgânicos: CH₄; Ponto_de_fusão (°C): menos_182; Ponto_de_ebulição (°C): menos_162.

Substância; Compostos orgânicos: CF₄; Ponto_de_fusão (°C): menos_150; Ponto_de_ebulição (°C): menos_129.

Substância; Compostos orgânicos: CCl₄; Ponto_de_fusão (°C): 23; Ponto_de_ebulição (°C): 77.

Substância; Compostos orgânicos: C₆H₆; Ponto_de_fusão (°C): 6; Ponto_de_ebulição (°C): 80.

Substância; Compostos orgânicos: CH3OH; Ponto_de_fusão (°C): menos_94; Ponto_de_ebulição (°C): 65.

Substância; Compostos orgânicos: Glicose; Ponto_de_fusão (°C): 142; Ponto_de_ebulição (°C): o sólido se decompõe.

Substância; Compostos orgânicos: Sacarose; Ponto_de_fusão (°C): 184 (o sólido se decompõe); Ponto_de_ebulição (°C): (sem valor).

A energia das forças_de_London também depende da forma das moléculas.

O pentano e o 2_2_dimetilpropano, por exemplo, têm a mesma fórmula molecular, C5H12, e têm, portanto, o mesmo número de elétrons.

No entanto, os dois compostos têm ponto_de_ebulição diferentes (36°C e 10°C, respectivamente).

As moléculas de pentano são relativamente longas e têm forma aproximadamente cilíndrica. As carga_parcial instantâneas em moléculas adjacentes de geometria cilíndrica podem interagir fortemente.

Por outro lado, as carga_parcial instantâneas de moléculas esféricas, como as do 2_2_dimetilpropano, não podem se aproximar porque o contato entre as moléculas é limitado a uma região muito pequena (Fig 5_7).

Como resultado da forte dependência em relação à distância (1 sobre r elevado à sexta potência, Eq5), as interações entre moléculas de geometria cilindroide são mais fortes do que entre moléculas de geometria esferoide com o mesmo número de elétrons.

Figura 5_7 (a) Os momento_de_dipolo instantâneos em duas moléculas cilíndricas vizinhas interagem fortemente e tendem a manter elas juntas.

(b) Os momento_de_dipolo instantâneos em duas moléculas esféricas vizinhas interagem fracamente e as mantêm mais afastadas.

Fortemente relacionadas com as forças_de_London são as interações dipolo_dipolo_induzido, mecanismo pelo qual uma molécula polar interage com uma molécula apolar (por exemplo, quando o oxigênio se dissolve em água).

Como as forças_de_London, as interações dipolo_dipolo_induzido têm sua origem na capacidade que tem uma molécula de induzir um momento_de_dipolo em outra.

Neste caso, entretanto, a molécula que induz o momento_de_dipolo tem um momento_de_dipolo permanente.

A energia_potencial da interação é.

Energia_potencial é diretamente proporcional ao produto entre momento_de_dipolo elétrico ao quadrado de uma molécula (μ_1^2 ao quadrado) e a polarizabilidade de outra molécula (α_2), e é inversamente proporcional à distância entre as duas moléculas elevada à sexta potência.

Como muitas das outras interações que vimos, essa interação é inversamente proporcional à sexta potência da separação.

As energia_potencial das interações entre moléculas (as interações dipolo_dipolo de moléculas em rotação, as forças_de_London e as interações dipolo_dipolo_induzido) tem a forma.

Energia_potencial é igual à razão entre C e a distância r elevada à sexta potência, entre as duas moléculas, em que C depende das moléculas e do tipo de interação.

As forças_de_London surgem da atração entre os dipolos elétricos instantâneos de moléculas vizinhas e agem em todos os tipos de moléculas.

Sua energia aumenta com o número de elétrons da molécula.

Elas se superpõem às interações dipolo_dipolo.

Moléculas polares também atraem moléculas apolares através de interações fracas dipolo_dipolo_induzido.

Exemplo 5_2 Explicação das tendências dos ponto_de_ebulição.

Explique as tendências dos ponto_de_ebulição dos halogenetos de hidrogênio: HCl, menos_85°C; HBr, menos_67°C; HI, menos_35°C.

Estratégia Forças_intermoleculares mais fortes levam a ponto_de_ebulição mais altos.

Os momento_de_dipolo e a energia das interações dipolo_dipolo aumentam com a polaridade da ligação HX e, portanto, com a diferença de eletronegatividade entre os átomos de hidrogênio e de halogênio.

A energia das forças_de_London aumenta com o número de elétrons.

Use os dados para decidir qual é o efeito dominante.

Solução Os dados da Fig 2_12 mostram que diferenças de eletronegatividade diminuem de HCl para HI; logo, os momento_de_dipolo diminuem e, em consequência, as forças dipolo-dipolo também diminuem, uma tendência que sugere que os ponto_de_ebulição deveriam diminuir de HCl para HI.

Como essa previsão entra em conflito com os dados, é preciso examinar o que acontece com as forças_de_London.

O número de elétrons da molécula aumenta de HCl para HI; logo, as forças_de_London também crescem.

Portanto, os ponto_de_ebulição deveriam crescer de HCl para HI, o que está de acordo com os dados experimentais.

Essa análise sugere que as forças_de_London predominam sobre as interações dipolo-dipolo no caso dessas moléculas.

Teste 5_2A Explique a tendência dos ponto_de_ebulição dos gases nobres, que aumentam do hélio para o xenônio.

[Resposta: A energia das forças_de_London aumenta com o número de elétrons].

Teste 5_2B Sugira uma razão para que o trifluorometano, CHF₃, tenha ponto_de_ebulição mais alto do que o tetrafluorometano, CF₄.

Ligação_hidrogênio.

As forças_de_London são universais, no sentido de que elas se aplicam a todas as moléculas, independentemente de sua identidade química.

As interações dipolo-dipolo dependem somente da polaridade das moléculas, e não de sua identidade química.

Existe, no entanto, outra interações_intermoleculares muito forte que é específica para certos tipos de moléculas.

A existência de uma interação especial começa a ficar aparente quando analisamos os ponto_de_ebulição de composto binário de hidrogênio com os elementos dos grupos 14/IV a 17/VII (Fig 5_8).

A tendência no Grupo 14/IV é a que se esperaria para compostos semelhantes com número diferente de elétrons, isto é, os ponto_de_ebulição aumentam de cima para baixo no grupo, porque a energia das forças_de_London aumenta.

A amônia, a água e o fluoreto de hidrogênio, entretanto, têm comportamento anômalo.

Os ponto_de_ebulição excepcionalmente altos sugerem que existem forças_de atração muito fortes entre as moléculas.

Figura 5_8 Os ponto_de_ebulição da maior parte dos hidretos moleculares dos elementos do bloco p mostram um aumento suave com a massa_molar em cada grupo.

Entretanto, três compostos, amônia, água e fluoreto de hidrogênio, têm comportamento anormal.

A interação forte responsável pelos altos ponto_de_ebulição dessas e de outras substâncias é devida à chamada ligação_hidrogênio.

Apesar do nome, a ligação_hidrogênio não é uma ligação_covalente.

Ela é uma atração intermolecular, na qual um átomo de hidrogênio fica entre dois átomos pequenos, fortemente eletronegativos, que têm par_de_elétrons, principalmente nitrogênio, oxigênio ou flúor.

Comumente, uma das moléculas deve ter um grupo OH, NH, ou FH, que cede o átomo de hidrogênio, e, a outra, um átomo de oxigênio, nitrogênio ou flúor, que cede o par_de_elétrons.

Para entender como se forma a ligação_hidrogênio, imaginemos o que acontece quando uma molécula de água se aproxima de outra.

As ligações OH são polares.

O átomo de oxigênio, que é eletronegativo, atrai fortemente os elétrons da ligação, deixando o átomo de hidrogênio quase completamente desprotegido.

Como este último é pequeno, ele pode se aproximar bastante, com sua carga_parcial positiva, de um dos par_de_elétrons do átomo de oxigênio de outra molécula de água.

O par_de_elétrons e a carga_parcial positiva se atraem fortemente e formam a ligação_hidrogênio.

A ligação_hidrogênio é mais forte quando o átomo de hidrogênio está na linha que une os dois átomos de oxigênio.

A ligação_hidrogênio é representada por uma linha pontilhada; logo, a ligação entre dois átomos de oxigênio é representada por OH...O.

Na água, a distância OH é igual a 101pm, e a distância H₂O é ligeiramente maior. No gelo, ela é igual a 175pm.

Teste 5_3A Quais das seguintes ligações intermoleculares podem ser atribuídas à ligação_hidrogênio: (a) CH₃NH₂ a CH₃NH₂; (b) CH₃OCH₃ a CH₃OCH₃OCH₃; (c) HBr a HBr?

[Resposta: Somente (a) tem hidrogênio diretamente ligado a nitrogênio, oxigênio ou flúor].

Teste 5_3B Quais das seguintes moléculas podem participar de ligação_hidrogênio no estado puro: (a) CH₃OH; (b) PH₃; (c) HClO (cuja estrutura é ClOH)?

Quando pode ocorrer, a ligação_hidrogênio é tão forte, cerca de 10 por cento da energia de uma ligação_covalente típica, que domina todos os demais tipos de interações_intermoleculares.

A ligação_hidrogênio é, de fato, tão forte que permanece até mesmo no vapor de algumas substâncias.

O fluoreto de hidrogênio líquido, por exemplo, contém cadeias em ziguezague de moléculas de HF e o vapor contém pequenos fragmentos de cadeias e anéis (HF)₆.

O vapor de ácido acético contém dímeros, isto é, pares de moléculas, ligados por duas ligação_hidrogênio.

As ligação_hidrogênio têm papel vital na manutenção da forma das moléculas biológicas.

A forma de uma molécula de proteína é governada principalmente por ligação_hidrogênio.

Quando essas ligações se quebram, a molécula de proteína, com sua organização delicada, perde a função.

Quando cozinhamos um ovo, por exemplo, a albumina da clara se torna branca como o leite, porque o calor quebra as ligação_hidrogênio entre suas moléculas, que se desmancham em um arranjo irregular.

As árvores se mantêm eretas por ligação_hidrogênio (Fig 5_9).

As moléculas de celulose (que têm muitos grupo OH) podem formar muitas ligação_hidrogênio umas com as outras, e a resistência da madeira se deve em grande parte às interações de ligação_hidrogênio entre molécula de celulose que se enrolam como fitas.

Figura 5_9 A vegetação, até mesmo árvores enormes como estas, se mantêm em pé pelas fortes ligação_hidrogênio intermoleculares que existem entre as moléculas de celulose, em forma de fita, que formam grande parte de sua estrutura.

Sem ligação_hidrogênio, estas árvores cairiam.

As ligação_hidrogênio mantêm juntas as duas cadeias das moléculas de DNA e são essenciais para o entendimento do processo de reprodução (veja a Seção 19_15).

As ligação_hidrogênio são suficientemente fortes para manter juntas as duas hélices do DNA, mas sua energia é muito menor do que as ligação_covalente típicas e elas podem ser desfeitas durante o processo da divisão celular sem afetar as ligação_covalente do DNA.

A ligação_hidrogênio, que ocorre quando átomos de hidrogênio estão ligados a átomos de oxigênio, nitrogênio e flúor, é o tipo mais forte de forças_intermoleculares.

Material.

Fases_condensadas.

Repulsão.

Densidade_de_elétrons.

Densidade_de_elétrons.

Eletronegatividade.

Polarizável.

Forças_interiônicas.

Interações_coulômbicas.

Íon_íon.