

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**

**FÁBIO LUIZ SERIBELI**

**INTERAÇÕES INTERMOLECULARES: ELEMENTOS PARA A DETERMINAÇÃO  
DE UMA ESTRUTURA CONCEITUAL**

São Paulo

Data do Depósito na SPG:  
**30/11/2021**

FÁBIO LUIZ SERIBELI

**INTERAÇÕES INTERMOLECULARES: ELEMENTOS PARA A DETERMINAÇÃO  
DE UMA ESTRUTURA CONCEITUAL**

Tese apresentada ao Instituto de Química da  
Universidade de São Paulo para obtenção do  
Título de Doutor em Ciências (Química).

**Orientador:** Prof. Dr. Flavio Antonio Maximiano

Versão corrigida da Tese

São Paulo

2021

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 elaborada eletronicamente pelo autor, utilizando o programa desenvolvido pela Seção Técnica de Informática do ICMC/USP e adaptado para a Divisão de Biblioteca e Documentação do Conjunto das Químicas da USP

Bibliotecária responsável pela orientação de catalogação da publicação:  
Marlene Aparecida Vieira - CRB - 8/5562

S485i Seribeli, Fábio Luiz  
Interações intermoleculares: elementos para a  
determinação de uma estrutura conceitual / Fábio  
Luiz Seribeli. - São Paulo, 2022.  
257 p.

Tese (doutorado) - Instituto de Química da  
Universidade de São Paulo. Departamento de Química  
Fundamental.

Orientador: Maximiano, Flavio Antonio

1. Interações intermoleculares. 2. Aprendizagem  
conceitual. 3. Ensino de química. 4. Ensino  
superior. 5. Mapas conceituais. I. T. II.  
Maximiano, Flavio Antonio , orientador.



"Interações Intermoleculares: elementos para a determinação de uma estrutura conceitual"

**FÁBIO LUIZ SERIBELI**

Tese de Doutorado submetida ao Instituto de Química da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Ciências - no Programa de Química.

---

Prof. Dr. Flavio Antonio Maximiano  
(Orientador e Presidente)

**APROVADO(A) POR:**

---

Profa. Dra. Liliana Marzorati  
IQ - USP

---

Prof. Dr. Luis Gustavo Dias  
FFCLRP - USP

---

Profa. Dra. Solange Wagner Locatelli  
UFABC

SÃO PAULO  
18 de fevereiro de 2022



## AGRADECIMENTOS

Ao meu Senhor e Salvador Jesus Cristo, pela força para que eu pudesse continuar meus estudos.

Aos meus pais, Cleide e Ademir (*in memoriam*), que sempre foram exemplos de caráter e dignidade. As minhas irmãs Carla e Vanessa, por toda amizade e apoio.

À Aline, minha esposa, agradeço todo o auxílio, a compreensão e constante presença amiga. Aos meus filhos Vitor, Felipe, Miguel e Igor pelos momentos de bem-estar.

Ao Professor Doutor Flavio Antonio Maximiano, pela confiança e forma como conduziu a mediação da construção do meu conhecimento nesse processo de orientação.

Aos amigos do LAPAQ (Laboratório de Pesquisa do Aprendizado em Química), em especial à Maria Helena Zambelli, por compartilhamento de ideias e dificuldades.

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo, pela oportunidade do afastamento e dedicação exclusiva em parte do doutorado.

Aos 11 professores pesquisadores respondentes, das diferentes instituições de ensino, que gentilmente participaram na constituição desta pesquisa.

À CAPES pelo apoio financeiro durante um período do curso de doutorado.

Agradeço a todos da minha família e amigos por estarem do meu lado ao longo dessa caminhada!

Nós não estamos totalmente desesperançados de que o peso real de cada um desses átomos será um dia conhecido (...) de que a forma e o movimento das partes de cada átomo e as distâncias que os separam possam ser calculadas; que os movimentos pelos quais eles produzem calor, eletricidade, luz, possam ser ilustrados por diagramas geométricos exatos, e que as propriedades fundamentais dos meios constituintes possam ser calculadas. Nesse dia, o movimento dos planetas e a música das esferas vão ser deixadas de lado um pouco, em admiração a confusão na qual esses pequenos átomos correm.

(William Thomson (Lorde Kelvin), 1871)

(...) o objetivo da educação é ajudar a tornar as pessoas mais livres, menos dependentes do poder econômico, político e social. A profissão de ensinar tem essa obrigação intrínseca.

(Francisco Imbernón, 2000)

## RESUMO

SERIBELI, F. L. **Interações Intermoleculares: elementos para a determinação de uma estrutura conceitual**. 2021. 254 f. Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Química. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo.

O propósito deste trabalho surgiu a partir de estudos e reflexões que identificam a importância das interações intermoleculares na graduação em química, encontrados nas principais produções relativas ao tema. No entanto, observou-se também, a necessidade de se avançar em debates que considerem as opiniões de especialistas, novas metodologias e estratégias de abordagem desse tema que permeia vários conteúdos da química, para uma aprendizagem significativa, que supere uma abordagem classificatória na perspectiva de uma abordagem molecular, tendo como cerne os conceitos fundamentais que um químico deva saber sobre interações intermoleculares, como fatores principais da pesquisa, tudo isso orientado pela pergunta-problema: *O que um químico deve saber sobre o tema 'interações intermoleculares'?*. Desse modo, o trabalho utilizou como metodologia, a análise de conteúdo de entrevistas com especialistas, com o objetivo de apontar os principais dados, conceitos e princípios para a aprendizagem das interações intermoleculares em um curso de ensino superior em química. Um levantamento bibliográfico foi realizado com o intuito de analisar a produção científica acerca do tema e também auxiliou na elaboração do roteiro de entrevistas, expresso em artigos que constem nas seguintes bases de dados: ERIC (Education Resources Information Center), Scientific Electronic Library Online (SciELO) e Web of Science (anteriormente conhecida como Web of Knowledge) e nas revistas da área de ensino de química: JCE (Journal of Chemical Education), CERP (Chemistry Education Research and Practice), EQ (Educación Química) e QN (Química Nova). As publicações estavam inseridas nas perspectivas de Conteúdos Conceituais, Aprendizagem e Propostas de ensino. Neste estudo, onze especialistas foram caracterizados como professores pesquisadores que desenvolvem o conteúdo em suas disciplinas e/ou cujas linhas de pesquisa se relacionam com o tema. Desse modo, foram aplicadas metodologias de caráter qualitativo, cujos resultados evidenciaram que o tema deve ser visto com maior centralidade durante a graduação em química. A análise dos artigos selecionados na pesquisa bibliográfica, em especial sobre os conteúdos conceituais, resultou em ideias-chave fundamentais e abrangentes no contexto do tema: equação de van der

Waals, energia de interação, interações dispersivas, ligações de hidrogênio e as propriedades físico-químicas. Dentro de tais ideias, aspectos essenciais levantados são resumidamente representados pela noção da origem da equação de van der Waals e o significado das constantes  $a$  e  $b$ . A energia de interação, importante para diferenciação entre ligações químicas e interações, suas equações que contribuem para a ideia de unificação das interações, a importante correlação da energia com as distâncias intermoleculares e os modelos do potencial de Lennard-Jones e quântico-computacionais, que contribuem para a ênfase de diversos conceitos relacionados à energia de interação. A pertinência do entendimento do caráter universal e aditivo das interações dispersivas, além da geometria molecular e polarizabilidade capitais em tais interações. A compreensão de distâncias e ângulos típicos das ligações de hidrogênio, a energia e natureza dessas ligações para a percepção do caráter covalente em alguns casos, além da importância na interpretação de inúmeros fenômenos. As propriedades físico-químicas consideradas imprescindíveis na abordagem do tema, uma vez que o conhecimento das interações oferece suporte às explicações das relações estrutura-propriedades. Os entrevistados apontaram a necessidade de aprimorar a abordagem do tema com ênfase no conhecimento mais profundo das estruturas moleculares, o que implica na compreensão de parâmetros moleculares como densidade eletrônica, polaridade e polarizabilidade, na percepção de que vários tipos de interações podem atuar num mesmo sistema e relacionar as energias de interações, suas magnitudes em função das separações intermoleculares. Os resultados do presente trabalho também podem servir como base para a hipótese defendida de que a compreensão das interações intermoleculares deve estar centrada nos parâmetros moleculares e fundamentalmente na distribuição e dinâmica dos elétrons nas estruturas moleculares. Além de proporcionar reflexões ou mudanças a serem consideradas, oferecendo suporte para outras investigações da área de ensino de química.

**Palavras-chave:** Interações Intermoleculares, aprendizagem conceitual, ensino de química, ensino superior, mapas conceituais.

## ABSTRACT

SERIBELI, F. L. **Intermolecular Interactions: Elements for Determining a Conceptual Structure**. 2021. 254 f. PhD Thesis - Graduate Program in Chemistry. Institute of Chemistry, University of São Paulo, São Paulo.

The purpose of this work emerged from studies and reflections that identify the importance of intermolecular interactions in chemistry graduation, found in the main productions related to the theme. However, it was also observed the need to advance in debates that consider the opinions of specialists, new methodologies and strategies to approach this theme that permeates various contents of chemistry, for a meaningful learning, that overcomes a classificatory approach in the perspective of a molecular approach, having at its core the fundamental concepts that a chemist should know about intermolecular interactions, as main factors of the research, all guided by the problem question: What should a chemist know about the topic 'intermolecular interactions'?. Thus, the work used as a methodology, the content analysis of interviews with experts, with the objective of pointing out the main data, concepts and principles for the learning of intermolecular interactions in a higher education course in chemistry. A bibliographic survey was carried out in order to analyze the scientific production on the subject and also helped in the elaboration of the interview script, expressed in articles contained in the following databases: ERIC (Education Resources Information Center), Scientific Electronic Library Online (SciELO) and Web of Science (formerly known as Web of Knowledge) and in journals in the field of chemistry education: JCE (Journal of Chemical Education), CERP (Chemistry Education Research and Practice), EQ (Educación Química) and QN (Química New). The publications were inserted in the perspectives of Conceptual Contents, Learning and Teaching Proposals. In this study, eleven specialists were characterized as research professors who develop content in their disciplines and/or whose lines of research are related to the theme. In this way, methodologies of a qualitative nature were applied, whose results showed that the topic should be seen with greater centrality during the graduation in chemistry. The analysis of the articles selected in the bibliographic research, especially on the conceptual contents, resulted in fundamental and comprehensive key ideas in the context of the theme: van der Waals equation, interaction energy, dispersive interactions, hydrogen bonds and the physical-chemical properties. Within such ideas, essential aspects raised are briefly

represented by the notion of the origin of the van der Waals equation and the meaning of the constants  $a$  and  $b$ . The interaction energy, important for differentiating chemical bonds and interactions, its equations that contribute to the idea of unification of interactions, the important correlation of energy with intermolecular distances and the Lennard-Jones and quantum-computational potential models, which contribute to the emphasis of several concepts related to interaction energy. The relevance of understanding the universal and additive character of dispersive interactions, in addition to the molecular geometry and polarizability that are essential in such interactions. The understanding of typical distances and angles of hydrogen bonds, the energy and nature of these bonds for the perception of the covalent character in some cases, in addition to the importance in the interpretation of numerous phenomena. The physical-chemical properties considered essential in approaching the theme, since the knowledge of interactions supports the explanations of structure-property relationships. The interviewees pointed out the need to improve the approach to the theme, with emphasis on a deeper knowledge of molecular structures, which implies the understanding of molecular parameters such as electron density, polarity and polarizability, in the perception that various types of interactions can act in the same system and relate the energies of interactions, their magnitudes as a function of intermolecular separations. The results of the present work can also serve as a basis for the hypothesis defended that the understanding of intermolecular interactions must be centered on molecular parameters and fundamentally on the distribution and dynamics of electrons in molecular structures. In addition to providing reflections or changes to be considered, offering support for other investigations in the area of chemistry teaching.

**Keywords:** Intermolecular interactions, conceptual learning, teaching chemistry, higher education, concept maps.

## LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Alguns exemplos de dados ou fatos que podem ser aprendidos nas aulas por Pozo e Crespo (2009).

Quadro 2 - Diferenças entre fatos e conceitos como conteúdos de aprendizagem por Pozo e Crespo (2009).

Quadro 3 - Diferenças entre algumas características das aprendizagens memorística e significativa em Coll *et al.* (2000).

Quadro 4 - Recorte da ficha de análise da entrevista com o especialista P1 a partir dos conteúdos conceituais.

Quadro 5 - Principais conceitos emergentes da análise dos artigos selecionados, conceitos que apareceram ao menos em dois trabalhos distintos.

Quadro 6 - Ligações de hidrogênio não clássicas.

Quadro 7 - Principais princípios presentes nos artigos analisados na pesquisa bibliográfica.

Quadro 8 - Categorias das concepções dos especialistas sobre a importância do tema em suas linhas de pesquisa e os principais conceitos relacionados.

Quadro 9 - Síntese dos conceitos fundamentais e fenômenos acerca do tema.

Quadro 10 - Principais princípios presentes que emergem da análise das entrevistas.

Quadro 11 - Síntese das informações das entrevistas em relação a disciplinas.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Gráfico apresentado em Kotz, Treichel e Weaver (2010) no tópico resumo das forças intermoleculares.

Figura 2 - Tipos de conteúdo, os mais específicos devem ser instrumentais para acessar os conteúdos mais gerais, que devem constituir a verdadeira meta do currículo de ciências (POZO; CRESPO, 2009).

Figura 3 - Conhecimentos prévios e suas principais características (SALVADOR et al. 2000, p. 41).

Figura 4 - Principais características dos fatos/dados.

Figura 5 - Principais características dos conceitos.

Figura 6 - Principais características dos princípios.

Figura 7 - Exemplos que demonstram a importância da frase de ligação nas proposições de um mapa conceitual.

Figura 8 - Ficha de análise dos artigos selecionados.

Figura 9 - Desenho da pesquisa com etapas da análise das publicações sobre Interações Intermoleculares.

Figura 10 - Desenho da pesquisa com etapas da análise das entrevistas com especialistas sobre Interações Intermoleculares.

Figura 11 - Quantidade de trabalhos selecionados para os diferentes termos de busca.

Figura 12 - Distribuição dos artigos selecionados de 1938 a 2019.

Figura 13 - Quantidade de publicações nas diferentes categorias ao longo dos anos.

Figura 14 - Distribuição dos trabalhos selecionados sobre interações intermoleculares nas revistas da área de ensino de química.

Figura 15 - Curvas de energia potencial para ligação de hidrogênio (LH) e interação de van der Waals (vdW) (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Figura 16 - Fracamente ligado (vermelho) e fortemente ligado (azul); curvas de energia potencial de interações interatômicas emparelhadas ( $E(R)$  em  $\text{cm}^{-1}$ ) transformadas em uma curva potencial canônica. No lado atrativo, o potencial canônico é avaliado em  $x$ ,  $0 \leq x \leq 1$ , enquanto no lado repulsivo o potencial canônico é avaliado em  $-x$ ,  $-1 \leq x \leq 0$ .

Figura 17 - Conceitos fundamentais sobre energia de interação com base na pesquisa bibliográfica.

Figura 18 - Pontos de ebulição de hidretos (IV-VII) em função do (A) número de elétrons por molécula e da (B) polarizabilidade.

Figura 19 - Conceitos fundamentais sobre as interações dispersivas com base na pesquisa bibliográfica.



Figura 20 - Classificação da covalência em interações intermoleculares através da relação entre a proporção do termo deslocalização/eletrostático e a distância da ligação de hidrogênio  $R(X-Y^{\delta-}\cdots H^{\delta+}-Z)$  (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Figura 21 - Ilustração dos raios atômicos ( $r_Y$  e  $r_H$ ), raios covalentes ( $r_H$  e  $r_X$ ) e ângulo ( $\theta$ ) de formação da ligação de hidrogênio (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Figura 22 - Conceitos fundamentais sobre ligação de hidrogênio com base na pesquisa bibliográfica.

Figura 23 - Conceitos fundamentais sobre equação de van der Waals com base na pesquisa bibliográfica.

Figura 24 - Pontos de ebulição e Entalpia de vaporização em função do nº de elétrons.

Figura 25 - Dímeros formados entre ácidos carboxílicos (Martins; Lopes; de Andrade, 2013).

Figura 26 - Representação das estruturas da vitamina A e da vitamina C (Martins; Lopes; de Andrade, 2013).

Figura 27 - Efeito da rigidez da cadeia em  $T_f$  (Méndez-Bautista e Coreño-Alonso, 2010).

Figura 28 - Conceitos fundamentais sobre as propriedades físico-químicas com base na pesquisa bibliográfica.

Figura 29 - Mapa conceitual sobre a estrutura conceitual das interações intermoleculares com base na pesquisa bibliográfica dos artigos.

Figura 30 - Conceitos fundamentais mais citados pelos especialistas entrevistados.

Figura 31 - Fenômenos que emergiram das opiniões dos especialistas entrevistados.

Figura 32 - Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos das entrevistas com todos os especialistas.

Figura 33 - Mapa Conceitual com os fenômenos sugeridos para abordagem das interações intermoleculares por todos os entrevistados.

Figura 34 - Mapa conceitual com as concepções sobre o tema no currículo.

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Natureza das interações fracas não covalentes (MURTHY, 2006).

Tabela 2 - Quantitativo de artigos selecionados nas diferentes revistas científicas.

Tabela 3 - Distribuição dos trabalhos em diferentes revistas científicas.

Tabela 4 - Representação típica de livros didáticos ilustrando a Força das Interações Intermoleculares.

Tabela 5 - Comparação de áreas superficiais com pontos de ebulição para alguns álcoois e alcanos (JASIEN, 2008).

Tabela 6 - Refratividade molar e polarizabilidade de hidretos do grupo 5A (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Tabela 7 - Componentes de energia para interações HF --- HX e X --- HF (kcal/mol) (KOLLMAN, 1977).

Tabela 8 - Propriedades e características das ligações de hidrogênio (STEED; ATWOOD, 2009).

Tabela 9 - Propriedades dos quatro grupos de hidretos (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Tabela 10 - Pontos de ebulição de alguns tetrahaletos do grupo IV (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

Tabela 11 - Pontos de fusão e ebulição de alguns silanos (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

Tabela 12 - Pontos de fusão e ebulição de alguns álcoois (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

Tabela 13 - Pontos de ebulição e viscosidade de alguns isômeros do Butanol (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

Tabela 14 - Pontos de ebulição e tensões superficiais de ésteres homólogos (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

Tabela 15 - Áreas superficiais com pontos de ebulição para alguns álcoois e alcanos (JASIEN, 2008).

Tabela 16 - Tipos de interações entre as moléculas para alguns compostos (BUENO, 1978).

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>17</b>
<b>2 QUESTÕES E OBJETIVOS DE PESQUISA</b>	<b>23</b>
<b>3 CONTEÚDOS CONCEITUAIS: UMA PERSPECTIVA PARA A DEFINIÇÃO DE UMA ESTRUTURA CONCEITUAL</b>	<b>24</b>
<b>4 MAPAS CONCEITUAIS: UM INSTRUMENTO PARA A EXPRESSÃO DE UMA ESTRUTURA CONCEITUAL</b>	<b>36</b>
<b>5. METODOLOGIA DE PESQUISA</b>	<b>40</b>
5.1. COLETA DE DADOS	40
5.1.1. <i>Pesquisa bibliográfica</i>	40
5.1.2. <i>Opinião de especialistas sobre o tema</i>	41
5.2. ANÁLISE DOS DADOS	42
5.2.1. <i>Pesquisa bibliográfica</i>	44
5.2.2. <i>Opinião de especialistas sobre o tema</i>	49
<b>6 RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>54</b>
6.1 PESQUISA BIBLIOGRÁFICA	54
6.1.1 <i>Energia de interação</i>	63
6.1.2 <i>Interações dispersivas</i>	80
6.1.3 <i>Ligação de Hidrogênio</i>	93
6.1.4 <i>Equação de van der Waals</i>	111
6.1.5 <i>Propriedades físico-químicas</i>	119
6.2 ESTRUTURA CONCEITUAL EMERGENTE DA PESQUISA BIBLIOGRÁFICA	144
6.2.1 <i>Conceitos</i>	144
6.2.2 <i>Princípios</i>	151
6.3 OPINIÃO DE ESPECIALISTAS NO TEMA	154
6.3.1 <i>O tema na pesquisa do especialista</i>	154
6.3.2 <i>Estrutura conceitual emergente das entrevistas com especialistas</i>	160
6.3.2.1 <i>Conceitos</i>	176
6.3.2.2 <i>Princípios</i>	182
6.3.3 <i>O tema nas disciplinas ministradas pelos especialistas</i>	188
6.3.4 <i>O tema no currículo</i>	203

<b>7 NOSSA TESE FINAL</b>	<b>209</b>
<b>8 CONCLUSÕES</b>	<b>213</b>
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>218</b>
<b>APÊNDICE A – FICHA DE ANÁLISE DOS ARTIGOS DA PESQUISA</b>	
<b>BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>227</b>
<b>APÊNDICE B – ROTEIRO DE ENTREVISTAS</b>	<b>232</b>
<b>APÊNDICE C – ANÁLISE DAS ENTREVISTAS A PARTIR DOS CONTEÚDOS</b>	
<b>CONCEITUAIS</b>	<b>233</b>
<b>APÊNDICE D – ARTIGOS DA CATEGORIA “CONCEITOS” ANALISADOS</b>	<b>240</b>
<b>APÊNDICE E – MAPAS CONCEITUAIS A PARTIR DA PESQUISA</b>	
<b>BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>242</b>
<b>APÊNDICE F – MAPAS CONCEITUAIS A PARTIR DAS ENTREVISTAS</b>	<b>247</b>

## 1 Introdução

Um dos principais objetivos do ensino de química é ensinar aos alunos a compreensão da relação entre estrutura molecular ou composição da matéria e suas propriedades. Essa relação entre molécula (estrutura) e propriedade, é algo que pode ser utilizado para a elaboração de novos materiais e processos. A maior parte do que encontramos no cotidiano não é caracterizado individualmente, um átomo ou espécie molecular, mas se considera sua natureza heterogênea. Para se obter um melhor entendimento das relações estrutura-propriedade, é imprescindível a compreensão da estrutura ou composição da matéria (ligações químicas) e da natureza das interações intermoleculares entre espécies moleculares, pois elas existem e com considerável proximidade. Um conceito universal tão importante quanto as interações intermoleculares, deve aparecer com maior ênfase no currículo de um curso de química (MURTHY, 2006).

Algo tão óbvio quanto à evidência de que a maioria dos materiais existe como líquidos e sólidos, mostra a importância das interações intermoleculares. Essas interações são fundamentais em muitos fenômenos comuns e interessantes que observamos, das interações dos medicamentos ao tingimento de fibras. A natureza das interações intermoleculares tem sido estudada por muitos anos, e sua descrição continua a ser objeto de modelagem quantitativa (BURKHOLDER; PURSER; COLE, 2008).

As interações intermoleculares têm considerável importância no comportamento como funções químicas e biológicas. As discussões sobre essas interações demonstram a importância das mesmas na escala molecular e como elas influenciam nas propriedades que são observadas no universo macroscópico. Identificaram-se na literatura muitas dificuldades dos estudantes sobre as interações intermoleculares, por exemplo, a influência da estrutura da molécula sobre a polaridade e as propriedades físicas das substâncias químicas.

Uma interação intermolecular significa que as moléculas apresentam atração ou repulsão entre si, sem acontecer quebra ou formação de novas ligações químicas. Estas interações já foram caracterizadas como interações não covalentes. As mesmas estão intimamente relacionadas com propriedades termodinâmicas de líquidos, sólidos e gases. Portanto, a aprendizagem de tais interações

intermoleculares, é de extrema relevância para se entender o comportamento de sistemas químicos a nível molecular (ROCHA, 2001).

Segundo Gottschalk e Venkataraman (2014), a literatura tem exemplos de materiais de aprendizagem que demonstram a influência das interações intermoleculares sobre o comportamento de sistemas químicos e que tentam ajudar os alunos a superarem as dificuldades de aprendizagem em relação ao tema. No entanto, a maior parte dos materiais didáticos, tem focalizado nas interações entre moléculas polares, em especial, por interações do tipo ligações de hidrogênio, com menor ênfase sobre forças de dispersão. Estes assuntos são considerados um desafio ao entendimento dos estudantes, um conteúdo que muitas vezes não é abordado em profundidade na graduação.

Um dos problemas de compreensão mais apontados pela literatura está relacionado ao fato dos alunos acreditarem que moléculas polares apenas apresentam interações de natureza dipolar, não considerando que as interações dispersivas também estão presentes e, em muitos casos, contribuem de forma significativa para a energia de interação, ou seja, que as interações dispersivas são universais (MURTHY, 2006). Tal problema é apontado como consequência da forma como o conteúdo costuma ser ensinado e apresentado na maioria dos livros didáticos, em que cada tipo de interação é apresentado de forma isolada, de maneira que tende a levar à conclusão que são fenômenos independentes, onde a polaridade das moléculas determina um único tipo de interação envolvido (JASIEN, 2008).

Dessa forma, quando se explica ao aluno que a ligação de hidrogênio é o tipo mais forte de interação intermolecular, seguida da dipolo-dipolo e, finalmente, das forças de dispersão, comumente, se dá aos estudantes a concepção errônea de que a ligação de hidrogênio terá as interações intermoleculares mais fortes, portanto, as substâncias que apresentam moléculas com este tipo de interação, apresentam propriedades físicas, como os pontos de ebulição maiores. Além disso, alguns livros didáticos apresentam essa ideia por meio de tabelas, que mostram as energias associadas a várias interações intermoleculares (Tabela 1), o que pode facilmente levar a uma aprendizagem equivocada, com base no raciocínio perfeitamente lógico. Os valores de energia das interações e os dados nessas tabelas parecem implicar ser impossível, para uma molécula apolar, com apenas forças dispersivas, ter interações intermoleculares da mesma força, de uma molécula polar (JASIEN, 2008).

Tabela 1 - Natureza das interações fracas não covalentes.

Interações não covalentes	Tipos de Interações Substâncias, A e B		Natureza da Interação: (a) Tipo de força (b) Energia da Interação <sup>a</sup>
<b>Eletrostática</b>	íon-dipolo	A: Iônica B: covalente polar	(a) Eletrostática (b) 0,2-4,0kJ/mol (distância de separação de ~1 nm). A força diminui de $r^2$ para interações íon-dipolo e $r^4$ para íon-dipolo induzido.
	íon-dipolo induzido	A: Iônica ou covalente polar B: covalente apolar	
<b>Van der Waals</b> (substâncias sem carga líquida)	dipolo-dipolo	A, B: covalente polar	(a) Eletrostática (b) 0,5-4kJ/mol (distância de separação de ~1 nm). A força diminui de $r^3$ para interações dipolo-dipolo e $r^6$ para dipolo-dipolo induzido.
	dipolo-dipolo induzido	A: polar B: covalente apolar	
	dipolo induzido-dipolo induzido (Forças de London, Forças de dispersão) <sup>b</sup>	Todas substâncias	(a) interações atrativas entre cargas flutuantes. (b) 0,2-2kJ/mol (distância de separação de ~1nm). A força diminui de $r^6$ .
<b>Ligação de Hidrogênio</b> Requer interação entre átomos específicos, como mostra (A é o doador, B é o aceptor) $A-H + :B \leftrightarrow A-H \cdots B$ Diminui a ligação A-H. Distância entre H e B no complexo pode ser menor que a soma de seus raios de van der Waals. Direcional (geralmente 180°). Estequiometria		A: compostos com ligações covalentes fortes contendo átomo de hidrogênio como parte do dipolo B: compostos com par de elétrons livres ou cargas negativas ou elétrons pi.	(a) Doador-aceptor/interação eletrostática (b) 10-40kJ/mol (distância de separação entre A e B < 0,4 nm) (~2kJ/mol para aqueles envolvendo aceptores de elétrons pi).

<sup>a</sup>A magnitude depende da carga líquida, do tamanho das espécies, da distância de separação ( $r$ ) e da temperatura. Seu valor é inversamente proporcional ao  $r^n$  ( $n$  variando de 2-6 para várias interações). Os valores aqui indicados são valores típicos usados em livros de texto comuns. <sup>b</sup>O principal fator para interações não covalentes, exceto em moléculas pequenas e altamente polares. Muitas vezes referidas como interações hidrofóbicas, em sistemas biológicos.

Fonte: Murthy (2006), p. 1011.

Murthy (2006), também aponta que este tipo de classificação e diferenciação energética das diferentes categorias de interação intermolecular (Tabela 1) pode provocar uma compreensão equivocada dos alunos. Apesar de a tabela apresentar valores associados a cada tipo de interação, o que é positivo, muitos materiais didáticos omitem, por exemplo, a universalidade das forças de London, pois ela está presente em qualquer processo interativo entre moléculas, o que conseqüentemente contribui para uma abordagem classificatória das interações intermoleculares.

Frequentemente os estudantes não conseguem explicar porque as interações intermoleculares de um sistema são mais intensas do que de outras. Por exemplo, ao comparar sistemas formados por moléculas polares, compostos de hidrogênio, formados por elementos das famílias IVA e VA da tabela periódica, nota-se que os compostos da família VA, apresentam pontos de ebulição mais altos do que os observados na família IVA, mesmo tendo número de elétrons semelhantes (volume molecular semelhante). Este fato não se justifica pela presença das forças dipolo - dipolo inerentemente fortes, e sim devido a aditividade dessas interações com as forças de dispersão existentes (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Caso seja considerada apenas a ordem de intensidade citada anteriormente, os alunos podem ser levados a ideias erradas, como a de que os compostos que interagem por ligações de hidrogênio sempre terão os maiores pontos de ebulição. Este fato é verificado quando se observa a variação dos pontos de ebulição de compostos formados por elementos das famílias VA a VIIA (nitrogênio, oxigênio e flúor) da tabela periódica, com o hidrogênio. Entretanto, essa informação não é válida, porque, quando são feitas comparações entre o ponto de ebulição da água e de um hidrocarboneto (alcano) de cadeia longa.

No caso do hidrocarboneto (alcano) de cadeia longa tem-se o efeito aditivo das forças dispersivas, a área de contato que possibilita várias interações com as moléculas vizinhas e por consequência a energia de interação entre as suas moléculas será alta. Portanto, a temperatura de ebulição também será alta em função da energia suficiente para romper as interações e promover a separação das moléculas (mudança de estado físico). Dependendo do tamanho da cadeia carbônica será observada uma temperatura de ebulição maior do que a da água.

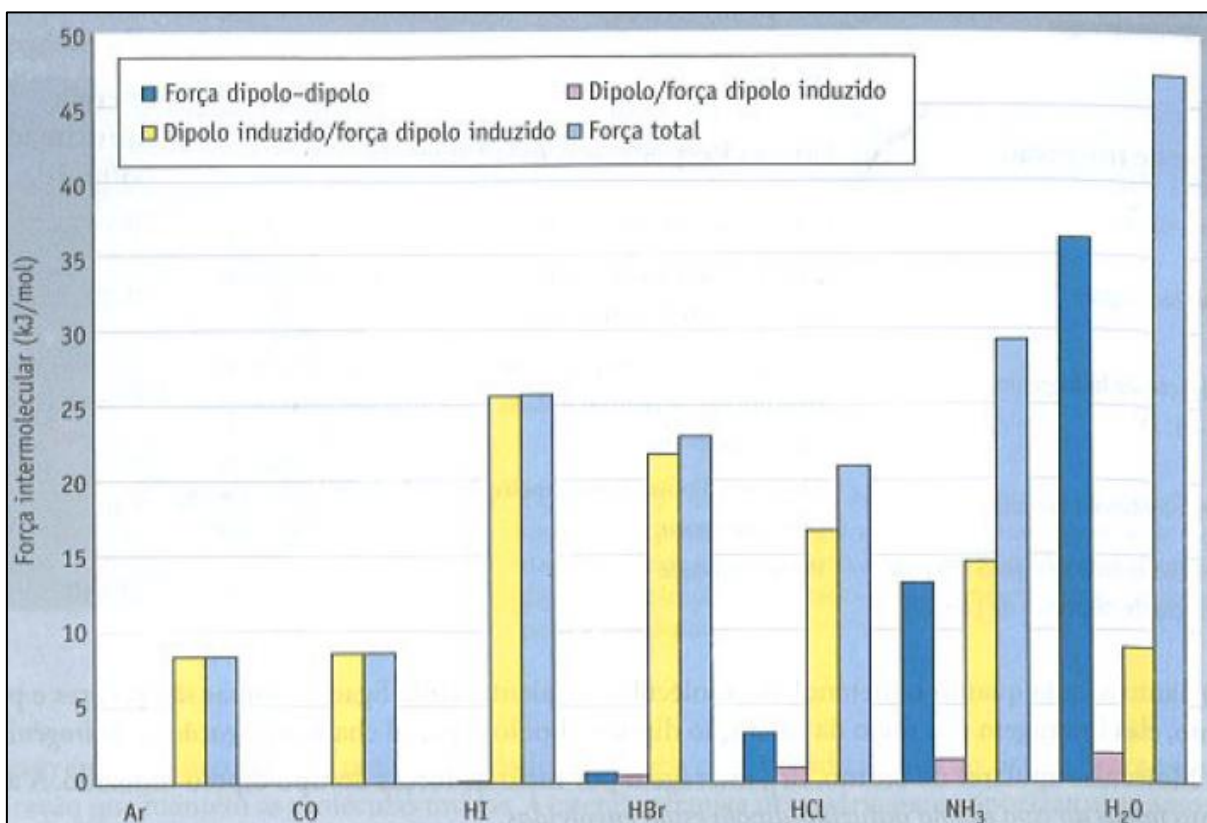
De uma forma geral, a natureza aditiva das interações é em geral suprimida ou tratada de forma muito implícita no ensino. Assim, não fica claro para os alunos que em um mesmo sistema são encontrados vários tipos de interações intermoleculares, que estabelecem parcelas de contribuição em uma somatória para a energia de interação total.

Uma forma de evitar este problema pode ser o uso de diagramas, como o presente no livro de Kotz, Treichel e Weaver (2010) (Figura 1). O gráfico de barras mostra algumas moléculas e a contribuição energética das forças dipolo-dipolo, dipolo induzido-dipolo induzido e dipolo-dipolo induzido para cada sistema, ressaltando a contribuição de cada uma dessas forças. Neste exemplo, verifica-se que moléculas



apolares apresentam sim, apenas interações do tipo dipolo induzido, enquanto que em moléculas polares como HI, HBr e HCl apresentam além de interações dipolares interações do tipo indutivas como as de dipolo-dipolo induzido e de dispersão, sendo que, no caso destas três substâncias, as interações dispersivas (dipolo induzido-dipolo induzido) são as que mais contribuem para a força de interação intermolecular.

Figura 1 - Gráfico apresentado em Kotz, Treichel e Weaver (2010) no tópico resumo das forças intermoleculares.



Fonte: Química Geral I e Reações Químicas, v.1 (Kotz, Treichel e Weaver (2010, p. 531).

Alguns indicativos apresentados sobre a abordagem do tema na disciplina de química geral na graduação em química foram identificados em tese de doutoramento, defendida em nosso grupo de pesquisa por Junqueira (2017), que apontou ideias fundamentais que precisam ser levadas em conta nos processos de ensino e aprendizagem para a compreensão das interações intermoleculares:

- ✓ O entendimento das interações intermoleculares exige compreensão da estrutura molecular;
- ✓ A compreensão das interações intermoleculares requer o entendimento e uso das propriedades moleculares polarizabilidade e polaridade nas explicações;

- ✓ Devem-se superar relações simplistas entre a variação da massa molecular e as mudanças de estado físico;
- ✓ Compreender que vários tipos de interações intermoleculares podem estar atuando no mesmo sistema;
- ✓ Compreender a universalidade das forças dispersivas de London.
- ✓ Necessidade de relacionar intensidade e alcance das interações intermoleculares;
- ✓ Necessidade de saber interpretar os valores de energia típicos das interações intermoleculares;
- ✓ As definições para as ligações de hidrogênio não devem ser restritas a presença de átomos de flúor, oxigênio e nitrogênio;
- ✓ Precisão no uso da linguagem química nas aulas e livros didáticos;
- ✓ Compreender e interpretar as equações das energias potenciais.

Diante do exposto, o presente trabalho é orientado pela seguinte questão de pesquisa: *O que um químico deve saber sobre o tema 'interações intermoleculares?'*

Buscando contemplar esta questão, a investigação proposta apoia-se na importância de se analisar o que especialistas, que de alguma forma trabalhem com o tema em suas disciplinas ou tenham suas pesquisas relacionadas ao mesmo, pensam sobre o que um químico deve saber sobre o tema interações intermoleculares. Também é importante realizar um levantamento do tema na literatura científica, em bases de dados e revistas específicas da área de ensino de química, para levantar o estado da arte do tema, tendo como pontos norteadores: I) o que é preciso saber sobre o tema; II) Dificuldades dos alunos; e III) Propostas de ensino.

Tais informações são importantes e necessárias para subsidiar as futuras práticas educacionais, a elaboração de materiais didáticos, bem como, a definição das metas educacionais e a elaboração da estrutura curricular.

## 2 Questões e objetivos de pesquisa

O presente trabalho é orientado pelas seguintes questões de pesquisa:

*i) O que um químico precisa saber sobre o tema interações intermoleculares ao término de seu curso de graduação?*

*ii) Quais são os princípios fundamentais e os conceitos que formam uma estrutura conceitual sobre este tema?*

Diante destas questões, o objetivo geral aqui proposto é determinar através de uma extensa pesquisa bibliográfica, baseada no que tem sido recentemente publicado e através da opinião de um grupo de especialistas, qual é a estrutura conceitual do tema interações intermoleculares. Entende-se como estrutura conceitual, o elenco dos principais conceitos e princípios que compõe o tema, suas definições e inter-relações, fundamentais para uma correta e profunda compreensão do assunto em questão.

Os objetivos específicos que orientam a pesquisa são divididos em 3 partes:

i) Fazer uma extensa pesquisa bibliográfica sobre o tema na literatura científica da área de ensino de química. A importância desta parte do presente estudo justifica-se, especialmente, para a análise das categorias (prévias) elencadas abaixo:

a) O que se tem pesquisado sobre o tema interações intermoleculares;

b) O que se diz a respeito do conteúdo especificamente os conceitos específicos e, em especial, os princípios expressos nas relações entre os conceitos fundamentais.

ii) Realizar entrevistas semiestruturadas com especialistas sobre o tema interações intermoleculares, afim de ter elementos a partir da opinião e experiência destes especialistas que permitam:

a) Elucidar o que deve ser ensinado no ensino superior em química sobre o tema;

b) Elencar os conteúdos conceituais fundamentais presentes no tema;

c) Listar os principais fenômenos químicos que podem ser úteis ao ensino e ao aprendizado do tema;

d) Revelar como as interações intermoleculares devem estar presentes num currículo de graduação em Química.

iii) Obter para as estruturas conceituais que emergem, tanto dos resultados da pesquisa bibliográfica quanto das entrevistas, um mapa conceitual que represente esta estrutura através dos conceitos e das relações proposicionais entre os mesmos.

### **3 Conteúdos conceituais: uma perspectiva para a definição de uma estrutura conceitual**

Existem vários tipos de conteúdos fundamentais para a formação dos estudantes. O enfoque do presente trabalho está nos conteúdos conceituais e dentre os conteúdos dos mais variados temas, há sempre a preocupação, além de ser necessário, conhecer quais os principais conceitos que organizam e fundamentam determinados temas.

Nesse sentido, as ideias que podem orientar esse propósito de identificar os conteúdos conceituais das interações intermoleculares, são as de Pozo e Crespo (2009), em que estes conteúdos são divididos em dados ou fatos, conceitos e princípios. Logo, com base nisso, o intuito é elencar os principais conteúdos relacionados ao tema na literatura e nas entrevistas com especialistas.

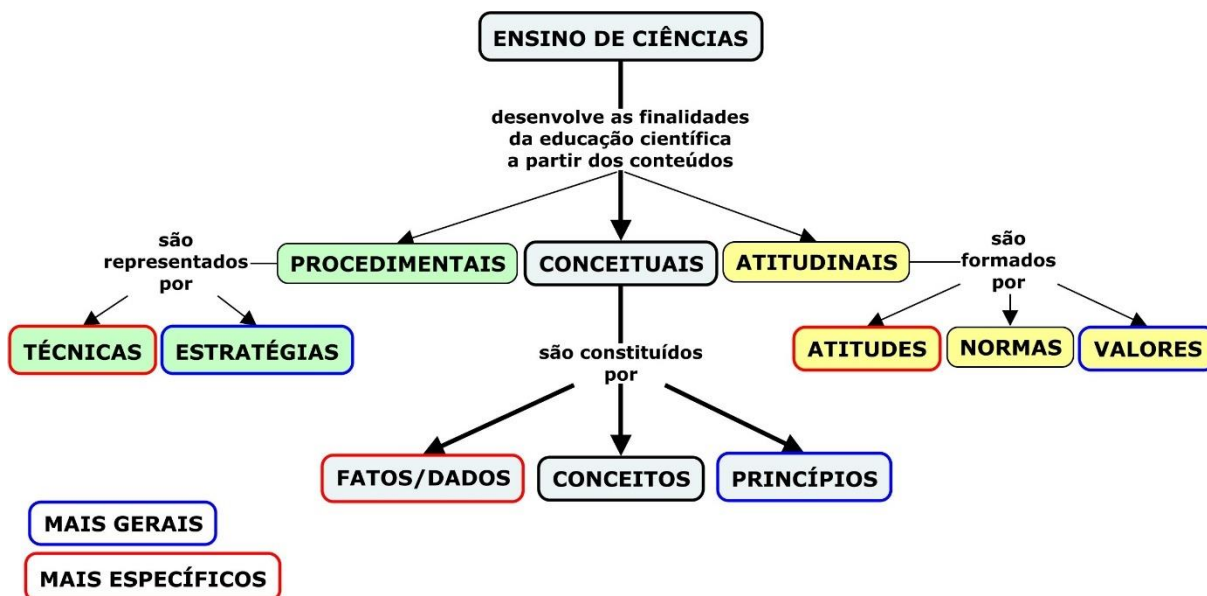
Sabendo que a maior parte dos currículos são planejados, principalmente em função desses conteúdos conceituais, nem sempre há discussões em relação à pertinência desses conteúdos, que já estão estabelecidos e presentes nos materiais como livros-texto e nem quais os conceitos fundamentais a serem abordados.

Uma organização útil para o conteúdo de ensino que vem sendo apresentada para o ensino básico é aquela que divide este conteúdo em três categorias básicas: conteúdos conceituais, conteúdos procedimentais e conteúdos atitudinais (POZO; CRESPO, 2009).

Os conteúdos conceituais são aqueles mais fáceis de se reconhecer como centrais no ensino de qualquer disciplina. São os conceitos, as leis as teorias que compõem e, até mesmo caracterizam a disciplina de química. Já os conteúdos procedimentais são constituídos pelas técnicas e estratégias que se necessita aprender para, por exemplo, realizar uma investigação ou resolver um problema. Por fim, os conteúdos atitudinais são aqueles formados pelas atitudes, normas e valores que se adquire durante o processo de ensino de uma dada disciplina, são conteúdos mais implícitos que explícitos, estão relacionados, muitas vezes, aos valores adquiridos durante o processo de ensino.

A (figura 2) apresenta os tipos de conteúdo no currículo de ciências com ênfase aos conteúdos conceituais.

Figura 2 - Tipos de conteúdo, os mais específicos devem ser instrumentais para acessar os conteúdos mais gerais, que devem constituir a verdadeira meta do currículo de ciências.



Fonte: autoria própria, baseado em Pozo e Crespo (2009).

Como já foi supracitado, o enfoque do presente trabalho está nos conteúdos conceituais, e considerando que a finalidade sobre “a aprendizagem de conceitos e a construção de modelos” irá exigir a superação de dificuldades de compreensão, que envolve a abordagem de conteúdos conceituais desde os mais específicos e simples (fatos/dados) até os conceitos estruturais da química (princípios) (POZO; CRESPO, 2009, p. 27).

Os conteúdos conceituais, na figura 2, podem ser divididos em três tipos principais nos currículos: os dados, os conceitos e princípios; um dado ou um fato é uma informação que diz algo sobre o mundo; a química que é uma ciência em que sua aprendizagem requer o conhecimento de muitos dados e fatos.

Alguns destes podem ser apresentados no (quadro 1) abaixo:

Quadro 1 - Alguns exemplos de dados ou fatos que podem ser aprendidos nas aulas.

<b>Dados ou fatos</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- O símbolo do cobre é Cu</li> <li>- A temperatura de ebulição da água a uma pressão de 1 atmosfera é de 100°C</li> <li>- A densidade da água pura é de 1 g/cm<sup>3</sup></li> <li>- O gelo derrete</li> <li>- O álcool evapora à temperatura ambiente</li> </ul>

Fonte: Pozo e Crespo (2009), p. 78.

Alguns desses dados são ensinados em sala de aula e necessários no ensino de química e outros são de conhecimento geral, provenientes das interações cotidianas. Por exemplo, não é preciso ensinar que a acetona evapora mais rapidamente que a água, é um fato que se conhece desde o contato com tais substâncias.

De acordo com Pozo e Crespo (2009), os fatos ou dados devem ser aprendidos de forma literal e reprodutiva, não há a exigência de compreensão, em geral, consiste na assimilação literal de informações verbais.

Já a aprendizagem de um conceito pelo estudante só pode ser considerada efetiva quando tal estudante atribui significado a esse conceito. Significado que está relacionado à explicação dada a partir da sua compreensão e das suas próprias palavras. O entendimento de conceitos faz com que o estudante o utilize na interpretação de propriedades e fenômenos (FRASSON; LABURÚ; ZOMPERO, 2019).

O ensino de conteúdos conceituais deve estar orientado para a compreensão, em vez de somente a acumulação de dados. Mas no sentido da aprendizagem conceitual, algumas distinções podem ser feitas entre os princípios ou conceitos estruturais de uma disciplina e os conceitos específicos. Tais princípios seriam conceitos mais gerais, muitas vezes abstratos e implícitos à organização conceitual de uma área. Assim, os princípios perpassam por todos os conteúdos de determinada disciplina e a compreensão plena, deve ser uma das finalidades ao incluí-los nos currículos, uma vez que se torna muito difícil a compreensão de ideias mais específicas, sem o domínio de tais princípios (POZO; CRESPO, 2009).

Embora o objetivo final deve ser o de buscar o entendimento dos conteúdos mais abstratos e gerais denominados de princípios, isso só é possível através dos conceitos e dados. O significado dos dados e dos conceitos decorre dos princípios e

estes por sua vez, apenas são alcançados via aprendizagem de dados e conceitos (POZO; CRESPO, 2009).

O (quadro 2) sintetiza as principais diferenças entre a aprendizagem de fatos e de conceitos ou entre a aprendizagem de informações verbais repetitivas e a significativa.

Quadro 2 - Diferenças entre fatos e conceitos como conteúdos de aprendizagem.

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

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

Como pode ser observado no Quadro 2, os fatos são aprendidos de modo literal, caracterizado por uma reprodução exata, com poucas contribuições além do aspecto de repetição. Desse modo, a aquisição de fatos e dados tem como característica o fato de o aluno saber ou não, isto é, o aluno sabe o símbolo da platina ou não sabe. Já em relação aos conceitos, o mais importante no aprendizado é entender como o aluno compreende e não analisar se o aluno sabe ou não tal conceito. E existem formas diferentes de acessar a compreensão dos alunos sobre determinados conceitos, para verificação de como se dá essa aprendizagem (POZO; CRESPO, 2009).

É importante destacar que muitos conceitos são plenamente compreendidos a partir do conhecimento de dados distintos, por exemplo, é fundamental conhecer os dados mais relevantes, referentes a um tipo de solução aquosa (tipo de soluto, pH, temperatura, etc.), no entanto, esses dados devem estar dentro de um sistema de conceitos que permita sua interpretação.

Dois aspectos interessantes a serem considerados em relação aos conceitos é a possibilidade de organização e previsão de ações no próprio conhecimento, qual material a ser utilizado, o melhor solvente, etc. Além dos conceitos nos permitirem dar sentido a tudo que nos cerca, categorizar e atribuir características semelhantes ou não a outros conceitos (COLL *et al.*, 2000).

É necessário entender uma característica fundamental dos conceitos científicos, sobre como devem estar relacionados a outros conceitos e muitas vezes

os significados deles, resultam das relações entre esses conceitos. Logo, a aprendizagem conceitual tem como característica o estabelecimento de relações significativas entre diferentes conceitos presentes no currículo (COLL *et al.*, 2000).

Pode-se dizer que a aprendizagem de fatos e dados pode ser classificada como aprendizagem memorística e a aprendizagem de conceitos como significativa, por exemplo, os estudantes podem entender a densidade como uma propriedade geral da matéria ou simplesmente reproduzir a equação ( $d = m/V$ ) e não compreender de forma significativa.

A principal ideia da aprendizagem significativa está relacionada com o aspecto no qual o que compreendemos é consequência de uma nova interpretação da informação a partir do que sabemos. Não é suficiente a reprodução de tal informação, é essencial que haja assimilação ou integração aos nossos conhecimentos anteriores (COLL *et al.* 2000).

Desse modo, a noção da distinção entre os tipos de aprendizagem que são utilizados para a compreensão de dados e conceitos é muito importante para reconhecer a maior exigência, para que ocorra uma aprendizagem significativa dos conceitos. O (quadro 3) sintetiza algumas diferenças importantes entre as aprendizagens memorística e a significativa.

Quadro 3 - Diferenças entre algumas características das aprendizagens memorística e significativa.

<b>Aprendizagem memorística</b>	<b>Aprendizagem significativa</b>
Nenhum esforço para integrar os novos conhecimentos com os já existentes na estrutura cognitiva.	Esforço deliberado para relacionar os novos conhecimentos com os já existentes na estrutura cognitiva;
Orientação para aprendizagens não relacionadas com experiências, fatos ou objetos.	Orientação para aprendizagens relacionadas com experiências, fatos ou objetos.
Nenhum envolvimento afetivo para relacionar os novos conhecimentos com aprendizagens anteriores.	Envolvimento afetivo para relacionar os novos conhecimentos com aprendizagens anteriores.

Fonte: Coll *et al.* (2000), p. 33.

Uma das principais características da aprendizagem significativa está relacionada ao aspecto de conectar os conhecimentos existentes aos novos conceitos científicos. Pode-se observar a partir do quadro, a importância dos conhecimentos prévios para uma aprendizagem significativa e se a compreensão dos conceitos pode ser baseada na mudança e evolução dos conhecimentos prévios dos alunos, por



consequente, é essencial saber algumas características desses conhecimentos prévios (COLL *et al.*, 2000).

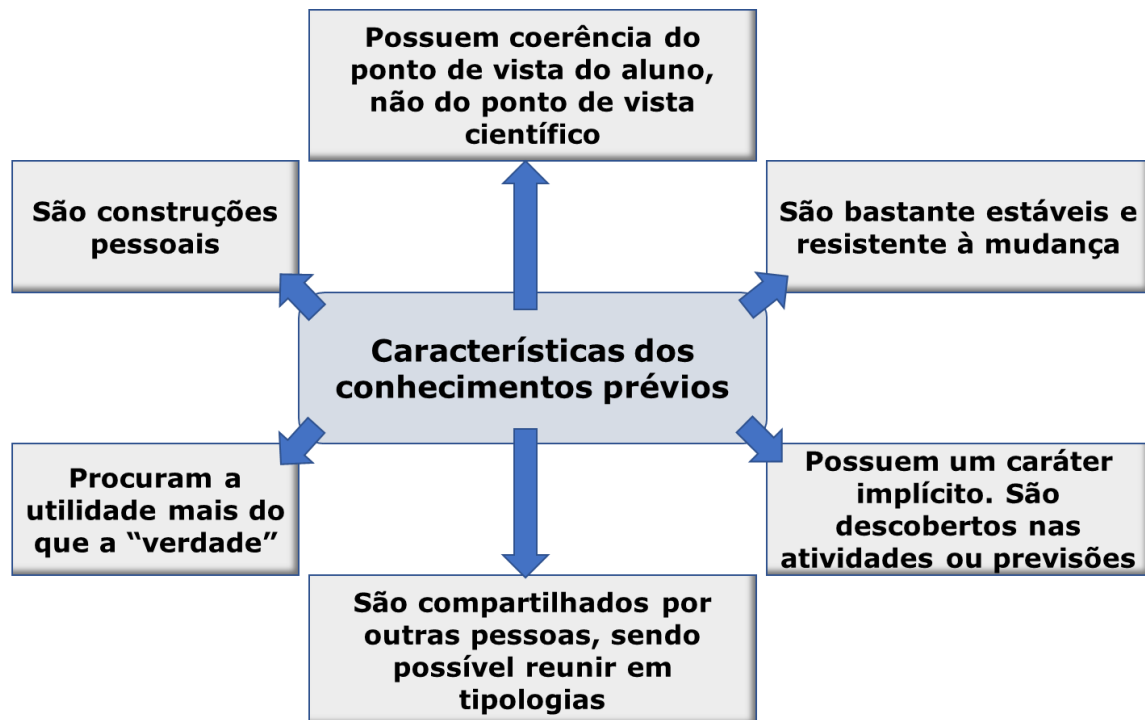
Considerando o que o aluno já sabe, a ideia-âncora é o elo para a construção de um novo conhecimento através da mudança das estruturas mentais existentes ou da elaboração de outras novas. Quando os estudantes refletem sobre um conteúdo novo, ele ganha significado e torna mais complexo os conhecimentos prévios (AUSUBEL, 1980).

Cabe destacar, que tais conhecimentos são construções pessoais dos estudantes, construídos de forma espontânea em suas interações cotidianas com o mundo. Essas interações são utilizadas para interpretar os conhecimentos, embora são comumente incoerentes do ponto de vista científico, mas não do ponto de vista do aluno (COLL *et al.* 2000).

Outro aspecto a ser considerado é a resistência à mudança, que persistem mesmo com muitos anos de instrução científica, em geral, os denominados conhecimentos prévios podem ser compartilhados por pessoas com características distintas, pois são poucas suas tipologias. Além do forte caráter implícito dos conhecimentos prévios dos alunos em relação aos conceitos científicos (COLL *et al.* 2000).

Finalmente, dentre todas as características, é importante saber que os conhecimentos prévios dos estudantes traduzem a busca da utilidade mais do que o verdadeiro conceito científico. A (figura 3) apresenta todas essas características referentes aos conhecimentos prévios.

Figura 3 - Conhecimentos prévios e suas principais características.



Fonte: Coll *et al.* (2000), p. 41.

A compreensão da aprendizagem conceitual como um processo fundamentado na mudança e evolução dos conhecimentos prévios dos estudantes, corrobora com a relevância em conhecer como são as características de tais conhecimentos.

A ideia de caracterizar os conhecimentos prévios permite a compreensão do processo complexo de mudança conceitual, a qual é necessária para a aprendizagem dos conceitos científicos. Essa reorganização conceitual é complexa, pois quando se altera a estrutura de conceitos de acordo com os processos, tem-se um dado conceito, por exemplo, o calor, que a partir de teorias pessoais não se considera distinto de temperatura, ao ser diferenciado, proporciona interpretações diferentes da realidade das que eram possíveis até então (SMITH; CAREY; WISER, 1985; COLL *et al.*, 2000).

Após os detalhes sobre como se dá a aprendizagem de dados e conceitos, entende-se a importância do papel exercido pelos conhecimentos prévios nesse processo de entendimento dos conteúdos conceituais, outras definições destes conteúdos são tratadas em uma perspectiva da psicologia do ensino.

Existe uma dificuldade na definição de fatos, conceitos e de princípios que não está relacionado somente à demanda pela elaboração de definições que atendam às exigências que apresentam a diversidade e a riqueza de nuances característicos

dos saberes dessa tipologia, mas também a necessidade de integrar os avanços em relação ao desenvolvimento cognitivo e os processos de mudança conceitual que diversificaram muito sua concepção ao longo dos anos (SALVADOR *et al.*, 2000). Nesse sentido, Salvador *et al.* (2000), p. 302, apresentam as definições dos fatos, conceitos e princípios:

Os **fatos** podem ser entendidos como algo que ocorre em um determinado momento e se podem referir características pelas quais se chegam a produzir.

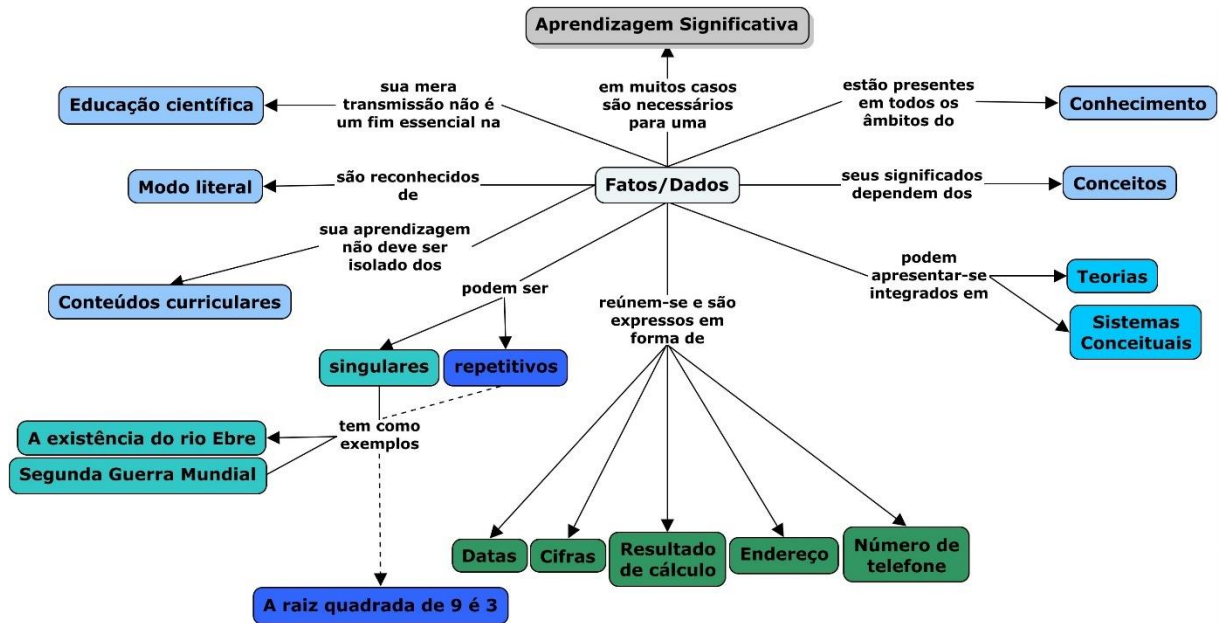
Os **conceitos** constituem representações das relações (de equivalência, de covariância, de causalidade, etc.) que estabelecemos entre alguns objetos, fatos ou símbolos e definem os traços essenciais ou que queremos destacar com uma determinada finalidade.

Os **princípios** são conceitos muito gerais, de um grande nível de abstração, que conformam a base de organização conceitual de um campo abrangente do conhecimento, já que transpassam todos os conteúdos, apesar de não se tornarem sempre explícitos. Podem diferenciar princípios que vertebram campos de saber mais interdisciplinares ou multidisciplinares (mudança, conflito, equilíbrio, interatividade, etc.) e outros que vertebram um único campo de conhecimento (o de vida, em biologia, o de tempo histórico em história, o de matéria, em física, o de saúde, em medicina, etc.)

A aprendizagem de fatos, de conceitos e de princípios é fundamental para a formação dos estudantes, pois ajuda no desenvolvimento da capacidade dos estudantes em serem pessoas que entendem como o mundo funciona (SALVADOR *et al.*, 2000).

Sendo assim, os fatos que podem atuar como referentes e ajudar a antecipar, prever ou decidir como se deve atuar. Conhecer as condições em que foram produzidos os fatos permite repeti-los, manipular o resultado obtido ou mantê-lo e valorizá-lo de modo objetivo. O mapa conceitual (figura 4) abaixo resume as características dos fatos/dados, segundo os autores Salvador *et al.* (2000).

Figura 4 - Principais características dos fatos/dados.



Fonte: Pozo e Crespo (2009), Salvador *et al.* (2000).

Os conceitos auxiliam a descrição, a interpretação e a explicação do mundo, ao manifestar a representação que temos e antecipam, orientam e fundamentam a conduta. O mapa conceitual abaixo (figura 5) resume as características dos conceitos segundo os autores Coll *et al.* (2000).

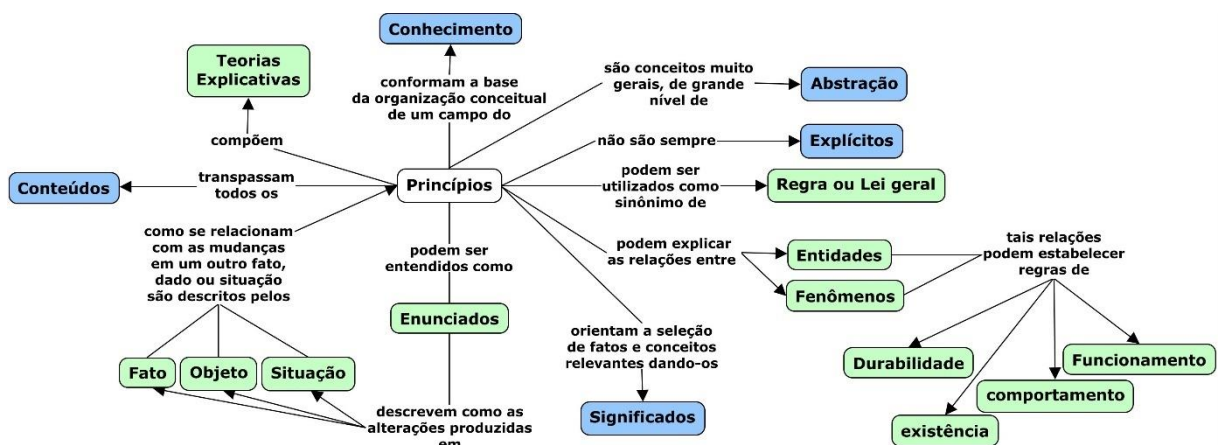
Figura 5 - Principais características dos conceitos.



Fonte: Pozo e Crespo (2009), Salvador *et al.* (2000).

Os princípios-chave determinam a realidade oferecida aos alunos: esses princípios orientam os conceitos e os fatos que foram considerados relevantes de determinada área curricular, atribuindo a estes sentido e significado. O mapa conceitual abaixo (figura 6) resume as características dos princípios segundo os autores Salvador *et al.* (2000).

Figura 6 - Principais características dos princípios.



Fonte: Pozo e Crespo (2009), Salvador *et al.* (2000).

Os fatos, os conceitos e os princípios configuram um conhecimento inter-relacionado, integrado na forma de fazer e de pensar das pessoas, que se altera de forma contínua e com base nas experiências pessoais, na assimilação de novos conhecimentos e na reflexão conjunta com outras pessoas (SALVADOR *et al.*, 2000).

Existem diferenças no processo de aprendizagem dos fatos e dos conceitos, também na estratégia de memorização, como repetições e elaboração das informações, que são úteis para lembrança dos mesmos (POZO, 1992; ZABALA, 1995).

É importante enfatizar que conceito não é algo isolado, mas para o seu aprofundamento, a sua extensão e o seu significado há certa dependência das relações significativas com outros conceitos. Pois, quanto mais interconexões na rede de conceitos que um estudante apresenta, maior será a capacidade para a compreensão dos conteúdos de uma determinada área do saber e a sua relação com outras áreas (SALVADOR *et al.*, 2000).

Os princípios também podem ser considerados responsáveis em ajudar no sentido de impor significado aos conceitos e a demarcá-los numa determinada visão da realidade. Desse modo, a forma como um conceito é caracterizado pelos estudantes é influenciado pelo entendimento dos princípios com os quais estão relacionados (SALVADOR *et al.*, 2000).

De acordo com Coll *et al.* (2000) a explicação psicológica dos conceitos, como são desenvolvidos e a relação com os princípios variou ao longo do tempo. Iniciou com uma visão clássica, em seguida uma visão de probabilística e por fim, a visão onde os conceitos estão integrados em teorias (SALVADOR *et al.*, 2000).

Em teorias clássicas do desenvolvimento conceitual, os conceitos são definidos como entidades que representam o cumprimento de uma série de aspectos fundamentais, suficientes e necessários em um objeto, fenômeno ou situação. O raciocínio com base no desenvolvimento, é representado em evolução, na capacidade de organizar o mundo em categorias estabelecidas e relacionadas hierarquicamente (SALVADOR *et al.*, 2000).

Em síntese, a educação conceitual deve proporcionar aos estudantes, conferir às teorias pessoais de maior coerência, auxiliando-os a revisar aquilo que pensam e como pensam. Torná-los capazes de elaborar ideias potenciais e explicativas em relação à realidade e auxiliá-los para serem mais autônomos, aumentando a sua segurança pessoal e capacidade de integração social (SALVADOR *et al.*, 2000).

A partir das principais características dos conteúdos conceituais que foram brevemente abordadas, uma forma de lidar com os materiais didáticos a serem investigados foi pensada com o propósito de fundamentar a análise de conteúdo de tais materiais. Os princípios e especialmente os conceitos fundamentais, que emergem da análise da literatura científica da área de ensino de química e de entrevistas com especialistas, sobre o tema Interações Intermoleculares no Ensino Superior em Química.

#### 4 Mapas conceituais: um instrumento para a expressão de uma estrutura conceitual

Mapas conceituais desempenham fortes relações com a teoria da Aprendizagem Significativa, que tem a sua origem na denominada teoria cognitivista de aprendizagem, inicialmente proposta por David Ausubel (AUSUBEL, 2003). No entanto, o método de elaboração de mapas conceituais foi desenvolvido por Joseph Novak e seus colaboradores (MOREIRA, 2010).

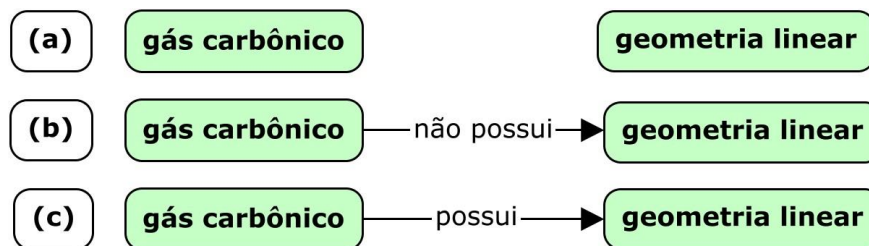
A aprendizagem é considerada significativa, quando um novo conceito adquire significados para o estudante, por meio da “ancoragem”, em aspectos importantes da estrutura cognitiva já existente de tal aluno. Conceitos, ideias e proposições que estão em sua estrutura de conhecimentos. É característica da aprendizagem significativa, a interação entre o conhecimento existente e o novo conhecimento, um conceito prévio, é a base para os significados atribuídos ao novo conceito, esse conhecimento prévio se modifica de forma a adquirir novos significados e, é um processo dinâmico de construção do conhecimento (MOREIRA, 2010).

Os mapas conceituais podem ser definidos como diagramas que estabelecem relações através de interligações explicativas, sendo estas representadas por setas, que apontam a existência de uma relação entre conceitos. A unidade constituída por dois conceitos conectados por uma frase de ligação é chamada de proposição e forma a menor unidade semântica de um dado mapa conceitual (MOREIRA; BUCHWEITZ, 1993).

Para demonstrar a importância da frase de ligação, na (figura 7) foram representados três exemplos de proposição. Na **proposição (a)** não será utilizado uma frase de ligação, não proporcionado conjecturas da relação entre os conceitos. Na **proposição (b)**, a proposição apresenta uma frase de ligação, logo, pode ser identificado um equívoco nesta proposição. A frase de ligação na **proposição (c)**, possibilita a observação da relação correta estabelecida a partir do conhecimento químico entre os conceitos, (De OLIVEIRA; MAXIMIANO, 2012):



Figura 7 - Exemplos que demonstram a importância da frase de ligação nas proposições de um mapa conceitual.



Fonte: De Oliveira e Maximiano (2012).

A elaboração de mapas conceituais pode ser caracterizada como uma técnica extremamente versátil, sendo utilizada em diversas situações e com diferentes propósitos, por exemplo, como instrumento de análise curricular, recurso didático, material de aprendizagem, forma de avaliação, etc. (MOREIRA; BUCHWEITZ, 1993).

Considerando a capacidade de representação dos mapas conceituais, eles podem ser explorados para exibir as principais relações entre conceitos abordados em aulas, materiais de ensino ou em um curso completo. Por consequência, os mapas conceituais podem ser ferramentas qualificadas para destacar os significados conferidos a conceitos e conexões entre conceitos, no contexto dos conhecimentos sobre determinado tema (MOREIRA, 1988; NOVAK, 1990).

Os mapas conceituais, como instrumentos multifacetados, são utilizados nas mais diversas áreas de pesquisa, que têm como propósito a identificação de uma determinada estrutura conceitual (REGIS; ALBERTAZZI, 1996).

O presente trabalho busca recorrer a essa versatilidade dos mapas conceituais, na medida em que uma estrutura conceitual pode ser extraída da análise de textos provenientes de artigos e transcrições de entrevistas em relação a um tema investigado. A transformação de textos em mapas conceituais viabiliza a obtenção da estrutura conceitual contida num dado texto e a representa de forma gráfica e simples. Tal transformação está presente na origem e desenvolvimento dos mapas conceituais como ferramentas de pesquisa. A técnica surgiu da necessidade de mostrar as relações entre conceitos a partir das transcrições das respostas dadas por crianças a questionamentos realizados por pesquisadores (NOVAK; MUSONDA, 1991).

Inúmeros trabalhos têm sido desenvolvidos para a transformação de textos em mapas conceituais. McLemore, Wehry e Carlson (2016) elaboraram mapas conceituais a partir de entrevistas, e Junqueira e Maximiano (2020) a partir de livros

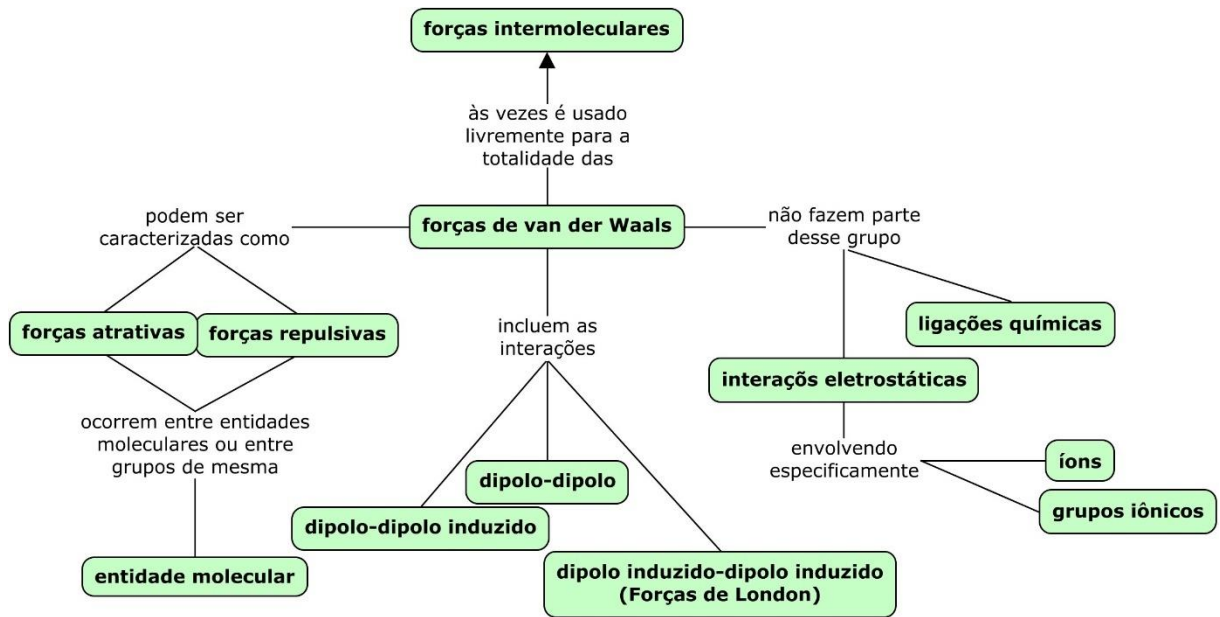
didáticos. Em suma, pode-se considerar que o procedimento de transformação dos conteúdos de textos em mapas conceituais, segue as seguintes etapas: codificação dos conceitos, identificação das relações entre os conceitos, transcrição das proposições, elaboração do mapa conceitual e revisão do mapa conceitual, organizando sua estrutura (GARCÍA-SALGADO; AGUILAR-TAMAYO, 2016; GARCÍA-SALGADO; AGUILAR-TAMAYO; ESPINOSA-MONTERO; MANZANO-CAUDILLO, 2014).

Os mapas conceituais são considerados diagramas de significados, das relações significativas e de hierarquias conceituais, buscam as conexões entre os conceitos de um determinado tema e hierarquiza-os e não os classifica. Apenas o fato da união de dois conceitos por uma linha, é relevante, porque significa que da perspectiva de quem fez o mapa ou de onde essa proposição foi extraída, que há uma relação entre tais conceitos (MOREIRA, 2010). Assim, os mapas conceituais podem ser caracterizados como ferramentas gráficas aptas a representar e organizar os conceitos e as suas inter-relações. No entanto, a construção de tais mapas, torna-se mais complexa, quando o autor não representa as suas próprias concepções, mas as ideias expressas em textos escritos por terceiros (NOVAK; CAÑAS, 2010).

Existem modelos hierárquicos para os mapas conceituais, onde os conceitos mais inclusivos são organizados na parte superior do mapa e os conceitos específicos, considerados menos abrangentes na parte inferior. No entanto, é somente um modelo e os mapas conceituais, inclusive os que foram elaborados neste trabalho, não precisam de tal tipo de hierarquia.

O presente estudo tem o propósito de utilizar os mapas conceituais como uma forma de representar e organizar o conhecimento, que emerge da análise de conteúdo das publicações da pesquisa bibliográfica e das entrevistas com os especialistas sobre o tema. Por fim, a seguir será apresentado um exemplo de mapa conceitual elaborado a partir da definição de forças de van der Waals da IUPAC *Compendium of Chemical Terminology*, (IUPAC GOLD BOOK, 2014):

As **forças de atração ou repulsão** entre **entidades moleculares** (ou entre grupos dentro da mesma entidade molecular) que não sejam devidas à formação de **ligações** ou à interação eletrostática de íons ou de **grupos iônicos** entre si ou com moléculas neutras. O termo inclui: **dipolo-dipolo**, **dipolo induzido por dipolo e forças de London** (dipolo induzido por dipolo instantâneo induzido). O termo é às vezes usado livremente para a totalidade das **forças intermoleculares** atrativas ou repulsivas inespecíficas.



Fonte: autoria própria.

## 5. METODOLOGIA DE PESQUISA

### 5.1. Coleta de dados

#### 5.1.1. Pesquisa bibliográfica

A etapa do presente estudo que foi desenvolvida pode ser classificada como pesquisa qualitativa com base em levantamento bibliográfico, pois o foco esteve voltado para um período específico, que abrange a publicação de trabalhos nas principais revistas e bases de dados da área de ensino de química no Brasil e no mundo, com o intuito de identificar e analisar as categorias citadas nos objetivos específicos.

A primeira base de dados utilizada foi a *Education Resources Information Center* (ERIC) - Centro de Informações sobre Recursos Educacionais, que é uma biblioteca digital de pesquisa educacional bibliográfica e de texto completo, incluindo artigos de revistas e outros materiais. ERIC é um programa administrado pelo *National Center for Education Evaluation and Regional Assistance* (NCEE) - Centro Nacional de Avaliação Educacional e Assistência Regional do *Institute of Education Sciences* (IES) - Instituto de Ciências da Educação do Departamento de Educação dos EUA. A ERIC recolhe e indexa material de pesquisa educacional para permitir que os usuários compreendam e implementem práticas educacionais, compreendam e avaliem políticas educacionais e ampliem conhecimento e compreensão da pesquisa educacional.

A segunda base de dados utilizada para a pesquisa bibliográfica, a *Scientific Electronic Library Online* (SciELO) é uma biblioteca eletrônica que abrange uma coleção selecionada de periódicos científicos brasileiros. A SciELO é o resultado de um projeto de pesquisa da FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, em parceria com a BIREME - Centro Latino-Americano e do Caribe de Informação em Ciências da Saúde. Desde 2002, conta com o apoio do CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

O Projeto teve como objetivo o desenvolvimento de uma metodologia comum para a preparação, armazenamento, disseminação e avaliação da produção científica em formato eletrônico. Com o avanço das atividades, novos títulos de periódicos estão sendo incorporados à coleção da biblioteca. A Rede SciELO é a maior provedora de periódicos indexados pelo Diretório de Periódicos de Acesso Aberto - *Directory of Open Access Journals* (DOAJ). A maioria dos periódicos latino-americanos indexados

pela *Web of Science* e *Scopus* é de acesso aberto, sendo a maior parte deles periódicos da SciELO. Nenhuma outra região do mundo tem esse nível de adoção de periódicos de acesso aberto indexados internacionalmente.

A terceira base de dados consultada no presente trabalho, a *Web of Science* (antes conhecida como *Web of Knowledge*) é um serviço de indexação de citações científicas baseado em assinatura, originalmente produzido pelo *Institute for Scientific Information* (ISI), agora mantido pela *Clarivate Analytics* (antes conhecida como *Intellectual Property* e *Science Business* da *Thomson Reuters*), que fornece uma pesquisa abrangente de citação. Dá acesso a múltiplos bancos de dados que fazem referência à pesquisa interdisciplinar, que permite a exploração aprofundada de subcampos especializados dentro de uma disciplina acadêmica ou científica.

Em especial, foram também pesquisados os trabalhos nas revistas: *Journal Chemical Education* (JCE), *Chemistry Education Research and Practice* (CERP), *Educación Química* (EQ) e *Química Nova* (QN). A escolha destas revistas justifica-se pelo fato de a pesquisa buscar uma abordagem do tema na área de ensino de química.

### **5.1.2. Opinião de especialistas sobre o tema**

Considerando os objetivos do presente trabalho e as análises realizadas, o estudo apresenta as características de uma pesquisa qualitativa, pois teve como objetivo buscar a compreensão de fenômenos amplos e complexos de natureza subjetiva. Para coleta de informações foi realizada a entrevista semiestruturada, por permitir certa organização dos questionamentos, ao mesmo tempo, em que pode ser estendida à medida que as informações vão sendo coletadas (FUJISAWA, 2000).

Participaram dessa pesquisa um grupo de onze especialistas formado por professores/pesquisadores que abordam/ensinam os primeiros conceitos do tema interações intermoleculares na graduação em química, geralmente nas disciplinas de química geral e/ou físico-química, profissionais que vivenciam na prática, o que é ensinado, as dificuldades dos alunos, os problemas de ensino-aprendizagem e, também, são especialistas (teóricos/experimentais), que trabalham diretamente ou suas linhas de pesquisa se relacionam com o tema, que contribuíram principalmente na elucidação da estrutura conceitual fundamental do tema **interações intermoleculares**.

## 5.2. Análise dos dados

Um método muito utilizado na análise de dados qualitativos é o de análise de conteúdo, que compreende um conjunto de técnicas de pesquisa com o objetivo da busca de sentido ou dos sentidos de um texto (documento).

Desta forma, a análise de conteúdo pode ser compreendida como “*um conjunto de técnicas de análise das comunicações, que se utiliza de procedimentos sistemáticos e objetivos de descrição do conteúdo das mensagens*” (BARDIN, 1977, p. 31). Contudo, este conceito não é suficiente para definir com detalhamento a técnica, a intenção é a dedução de conhecimentos relativos às condições de produção (ou, eventualmente de recepção), dedução esta que ocorre a indicadores quantitativos ou não. Por conseguinte, atualmente, a técnica de análise de conteúdo se refere ao estudo tanto dos conteúdos nas figuras de linguagem, reticências, entrelinhas, quanto dos manifestos (RODRIGUES; LEOPARDI, 1999).

É importante ressaltar, que existem as fases de uma análise de conteúdo apresentadas por vários autores para detalhar de maneira geral e sucinta os tópicos básicos. Desta forma, temos de acordo com Ludke e André (1986):

I) Fase de pré-exploração do material ou de leituras flutuantes do *corpus* das entrevistas;

II) A seleção das unidades de análise (ou unidades de significados);

III) O processo de categorização e subcategorização.

Segundo Manzini (2004), existem três categorias de entrevistas: estruturada, semiestruturada e não estruturada. Entende-se por entrevista estruturada é aquela que contém um questionário fechado, como formulários, não apresentando flexibilidade; semiestruturada é aquela direcionada por um roteiro previamente elaborado e tem em sua composição, questões mais abertas; não estruturada é aquela que oferece ampla liberdade na elaboração de perguntas e intervenções da fala do entrevistado. Para o presente trabalho foi escolhida a entrevista semiestruturada e conseqüente análise de conteúdo, que apresenta as seguintes etapas:

### *1) Leitura e releitura do texto obtido*

Esta etapa se faz importante, pois segundo Bardin (1977), cada entrevista é construída seguindo uma lógica particular. A apoiar os temas, a conservá-los

(manifestando-os ou escondendo-os), há uma organização implícita, uma espécie de calculismo, afetivo e cognitivo, na maioria das vezes, involuntário visto que a entrevista é mais um discurso espontâneo do que preparado. Sob a aparente desordem do tema, trata-se de procurar a estruturação característica, a dinâmica pessoal, que, por detrás da multidão de palavras, governa o processo mental do entrevistado. Cada qual tem não só o seu registro de temas, mas também a sua própria maneira de os (não) mostrar. Ao longo de várias entrevistas, e sobretudo se forem muitas, ver manifestarem-se repetições temáticas, pode também ver-se tipos de estruturação discursiva.

## *II) Definição de unidades de significado e sua categorização (categorias a posteriori)*

A divisão dos segmentos de mensagens analisadas em categorias não é uma etapa exigida de toda e qualquer análise de conteúdo. A maioria dos métodos de análise organiza-se em torno de um processo de categorização. A categorização é uma operação de classificação de elementos constitutivos de um conjunto por diferenciação e, seguidamente, por reagrupamento segundo a analogia, com os critérios anteriormente definidos. As categorias são classes, que reúnem um grupo de elementos (unidades de registro, no caso de análise de conteúdo) sob um título comum, agrupamento esse efetuado em função das características comuns destes elementos.

Quando, pela análise de conteúdo, se decide codificar o material, tem que se produzir um sistema de categorias. A categorização tem como objetivo inicial, fornecer uma ideia simplificada dos dados totais. A análise de conteúdo estrutura-se implicitamente na certeza de que a categorização (passagem de dados totais a dados organizados) não introduz desvios (por excesso ou por recusa) no material, mas que dá a conhecer índices invisíveis, ao nível dos dados totais (BARDIN, 1977).

## *III) Agrupamento e análise das categorias obtidas*

Agrupar elementos em categorias, obriga a investigação do que cada um deles tem em comum com outros. O que permite essa classificação é a parte comum existente entre eles. É possível, contudo, que outros critérios insistam noutros aspectos de analogia, talvez modificando consideravelmente a divisão anterior. A categorização é um processo de tipo estruturalista e comporta duas etapas:

- ✓ O inventário: isolar os elementos;

- ✓ A classificação: repartir os elementos, portanto, procurar ou impor certa organização às mensagens.

Segundo Bardin (1977), p. 97, um conjunto de categorias boas deve possuir as seguintes qualidades:

- A *exclusão mútua*: esta condição determina que cada elemento não pode existir em mais de uma divisão. As categorias deveriam ser construídas de tal maneira que um elemento não pudesse ter dois ou vários aspectos com tendência de fazerem com que fosse classificado em duas ou mais categorias.
- A *homogeneidade*: o princípio de exclusão mútua depende da homogeneidade das categorias. Um único princípio de classificação deve governar a sua organização.
- A *pertinência*: uma categoria é considerada pertinente quando está adaptada ao material de análise escolhido, e quando pertence ao quadro teórico definido. O sistema de categorias deve refletir as intenções da investigação, as questões do analista e/ou corresponder às características das mensagens.
- A *objetividade e a fidelidade*: estes princípios, tidos como muito importantes no início da história da análise de conteúdo, continuam a ser válidos. As diferentes partes de um mesmo material, ao qual se aplica a mesma maneira, mesmo quando submetidas a várias análises. As distorções devidas à subjetividade dos codificadores e à variação dos juízos não se produzem se a escolha e a definição das categorias forem bem estabelecidas. O organizador da análise deve definir claramente as variáveis que trata, assim como deve precisar os índices que determinam a entrada de um elemento numa categoria.
- A *produtividade*: adicionaremos às condições geralmente invocadas uma qualidade muito pragmática. Um conjunto de categorias é produtivo se fornece resultados férteis: férteis em índices de inferências, em hipóteses novas e em dados exatos.

Nesse sentido, a análise de dados das entrevistas foi efetuada a partir da análise de conteúdo, em busca dos conteúdos conceituais a partir das falas dos sujeitos da pesquisa em relação ao tema investigado.

### **5.2.1. Pesquisa bibliográfica**

A metodologia utilizada é caracterizada como uma pesquisa bibliográfica, uma vez que o estudo faz um levantamento do quantitativo de publicações, identificação e análise dos artigos selecionados sobre o tema. Diante disso, a partir da investigação dos artigos nacionais e internacionais publicados nas bases de dados até o ano de 2019. Optou-se por não delimitar um período inicial específico, pois há diferenças consideráveis entre as primeiras publicações das principais revistas analisadas.

A pesquisa seguiu as seguintes etapas:



- ✓ Seleção dos artigos nacionais e internacionais nas bases de dados;
- ✓ Leitura dos resumos e agrupamento por revistas e categorias pré-definidas;
- ✓ Leitura de cada artigo na íntegra e readequação dos artigos nas categorias;
- ✓ Elaboração de uma ficha de análise para cada publicação;
- ✓ Análise a partir dos conteúdos conceituais e elaboração de quadro com os principais dados/fatos, conceitos e princípios.
- ✓ Construção de mapas conceituais que revele as relações entre os conceitos.

Inicialmente, os dados foram coletados da pesquisa realizada nas seguintes bases de dados: ERIC, SciELO e Web of Science. O mapeamento dos trabalhos selecionados foi realizado com as seguintes palavras-chave: *interações intermoleculares, forças intermoleculares, ligações intermoleculares, interações de van der Waals e forças de van der Waals*, nos campos: títulos, palavras-chave e resumos. Optou-se por pesquisar o conjunto das interações e não especificamente cada tipo de interação, por exemplo, utilizar como palavra-chave “interação dipolo-dipolo” ou “ligação de hidrogênio”.

Em seguida, após a leitura dos resumos, os trabalhos foram separados em categorias definidas a priori como:

- I) Conceitos: O que se diz a respeito do conteúdo: conceitos fundamentais, ideias-chave, organização do conhecimento, esta categoria foi caracterizada como a principal do trabalho;
- II) Aprendizagem: Aspectos do aprendizado e dificuldades dos estudantes;
- III) Propostas: Propostas e metodologias de ensino.

Notou-se que a partir das bases de dados, muitas publicações pertenciam as principais revistas da área de ensino de química, logo, os artigos foram codificados com as iniciais representativas dos nomes das revistas: Journal of Chemical Education (JCE), Chemistry Education Research and Practice (CERP), Educación Química (EQ), Química Nova (QN) e Outras Revistas (OR) que reúnem diversas revistas da área de química, desde química teórica à biologia molecular.

Posteriormente, efetuaram-se buscas diretamente nas revistas citadas para aperfeiçoar a pesquisa, realizou-se a leitura completa dos trabalhos e readequação de alguns artigos nas diferentes categorias, uma vez que a maioria dos trabalhos apresenta conceitos fundamentais, entretanto, não são todos que discutem as dificuldades dos estudantes ou apresentam propostas de ensino.

Por último, uma ficha de análise para cada publicação foi elaborada com dados para identificação do artigo como autores, ano de publicação, número de páginas, país, etc. Um tópico denominado *análise*, com um resumo do artigo, uma síntese de cada subtítulo da publicação, questão de pesquisa, objetivos, comentários e observações, além dos conceitos em destaque, dados/fatos e ideias-chave para auxiliar na discussão.

Um exemplo da ficha de análise pode ser observado na (figura 8), o tópico da ficha chamado *categorização* foi constituído por um fragmento do artigo, uma breve análise do referido excerto, os conceitos em destaque envolvidos e a percepção sobre o que é tratado. Lembrando que a leitura dos trabalhos na íntegra, é fundamental nas pesquisas de estado da arte, pois revela características não observáveis somente nos resumos, por exemplo, a definição ou correlações entre conceitos importantes do tema investigado.

Figura 8 - Ficha de análise dos artigos selecionados.

<b>DADOS DO ARTIGO</b>			
<b>TÍTULO</b>			
<b>AUTORES</b>			
<b>BASE DE DADOS/REVISTA</b>			
<b>VOLUME</b>			
<b>Nº</b>			
<b>ANO</b>			
<b>PÁGINAS</b>			
<b>PAÍS</b>			
<b>UNIVERSIDADE</b>			
<b>ANÁLISE</b>			
<b>RESUMO</b>			
<b>Introdução</b>			
<b>Subtítulo 1</b>			
<b>Subtítulo 2</b>			
<b>Subtítulo 3</b>			
<b>Questões de pesquisa</b>			
<b>Objetivos</b>			
<b>Comentários e observações</b>			
<b>Conceitos em destaque</b>			
<b>Fatos, dados, exemplos, substâncias.</b>			
<b>Princípios</b>			
<b>CATEGORIZAÇÃO</b>			
<b>FRAGMENTO DO ARTIGO</b>	<b>ANÁLISE</b>	<b>CONCEITOS EM DESTAQUE</b>	<b>IDEIA-CHAVE</b>

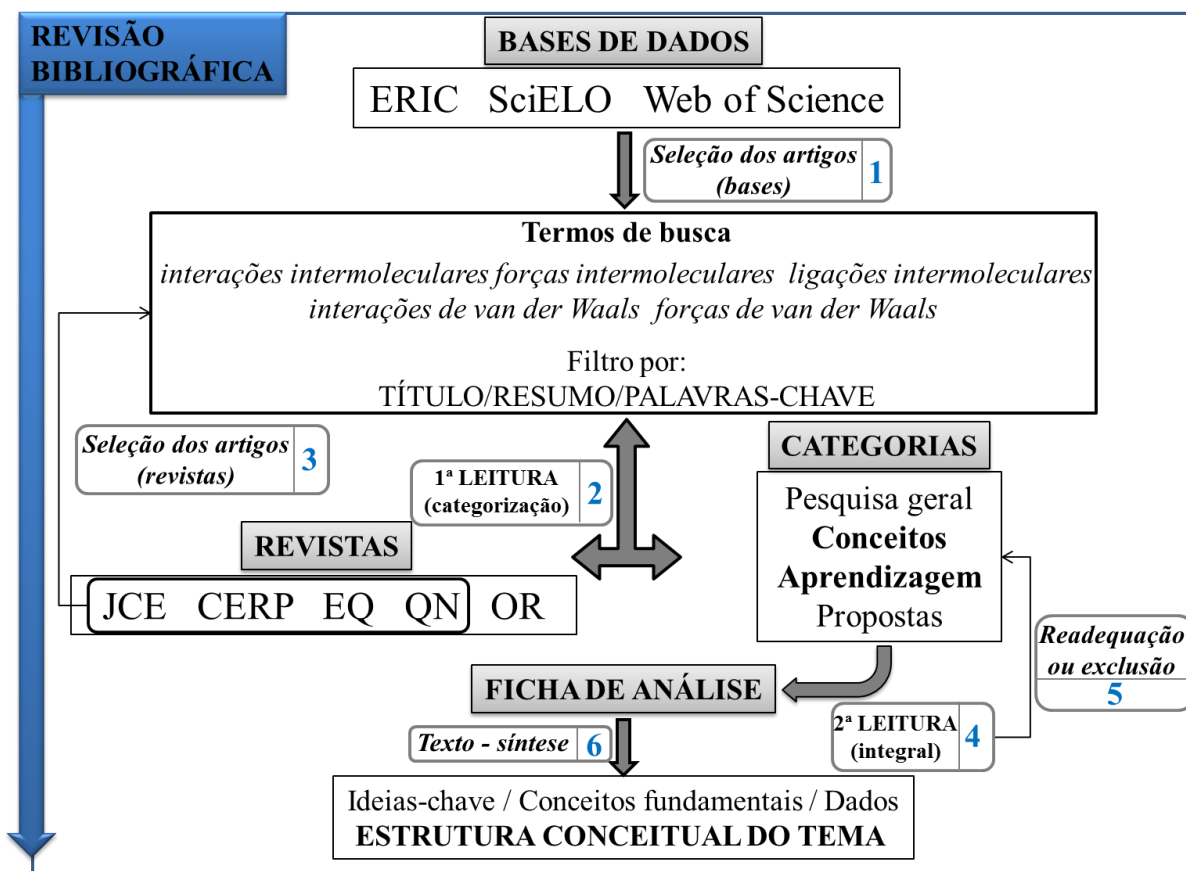
O item categorização da ficha de análise foi muito importante para a discussão dos resultados, em especial para demonstrar os principais conceitos acerca do tema e como se dá suas conexões com outros conceitos. Um pequeno recorte desse item abaixo para evidenciar sua relevância na análise.

CATEGORIZAÇÃO			
FRAGMENTO DO ARTIGO	ANÁLISE	CONCEITOS EM DESTAQUE	IDEIA-CHAVE
<p><i>“A segunda molécula possui a menor <b>área de superfície</b>, portanto as menores <b>forças de van der Waals</b> e, conseqüentemente, o menor <b>ponto de ebulição.</b>”</i></p>	<p>A área superficial das moléculas é correlacionada com as forças de van der Waals e conseqüentemente com os pontos de ebulição.</p>	<p><b>Área de superfície</b> <b>Forças de van der Waals</b> <b>Ponto de ebulição</b></p>	<p>Previsão dos pontos de ebulição de compostos orgânicos</p>

Em seguida, foi utilizada uma ferramenta que visa elaborar um mapa conceitual a partir de textos dos artigos da pesquisa bibliográfica (JUNQUEIRA e MAXIMIANO, 2020). A ferramenta de análise consiste em: 1) Seleção dos fragmentos dos textos a serem convertidos; 2) Seleção dos conceitos, considerando os que são fundamentais ao tema ou os que aparecem em grande frequência no texto; 3) Estabelecimento dos conceitos que aparecem relacionados e redação de uma frase de ligação que sintetize e represente essa relação, feita através de leitura e releituras atentas dos fragmentos selecionados e, 4) Construção do mapa conceitual utilizando o software CMap Tools® (CAÑAS *et al.*, 2004).

A (figura 9) apresenta o fluxograma que sintetiza o percurso metodológico da análise dos artigos. A ficha de análise completa de um dos trabalhos pode ser consultada no Apêndice A.

Figura 9 - Desenho da pesquisa com etapas da análise das publicações sobre Interações Intermoleculares.



Fonte: autoria própria.

### 5.2.2. Opinião de especialistas sobre o tema

A metodologia de pesquisa quanto aos especialistas, consiste na análise de conteúdo de entrevistas com onze pesquisadores, em busca das ideias centrais sobre as interações intermoleculares no conhecimento químico. Mais detalhes de como foram obtidos e analisados os dados para a proposta de uma estrutura conceitual do tema foram descritos.

O estudo apresenta as características de uma pesquisa qualitativa, pois tem como objetivo buscar a compreensão de fenômenos amplos e complexos de natureza subjetiva. A análise de conteúdo (BARDIN, 1977) tem o intuito de investigar textos (entrevistas transcritas) de forma sistemática, através de um sistema de categorias, desenvolvido a partir das entrevistas, orientado pela busca dos conteúdos conceituais.

Para a coleta de informações foi realizada a entrevista semiestruturada, por permitir que os entrevistados tenham a oportunidade de responder/apresentar suas concepções de maneira livre, sem alternativas de respostas pré-estabelecidas (MAYRING, 2002).

Participaram dessa pesquisa, onze professores de ensino superior em Química que também desenvolvem pesquisas (teóricas ou experimentais) das seguintes instituições: IQ-USP, IQ-UNICAMP, UFSCar, UFRGS, UFOB e FFCLRP-USP. O grupo é formado por dez homens e uma mulher, a experiência docente relatada variou de 7 a 26 anos de atuação.

As linhas de pesquisa de tais pesquisadores apresentam conexões com o tema interações intermoleculares dentre as quais, oito estudam simulações computacionais envolvendo desde macromoléculas biológicas, estudos espectroscópicos e simulações de dinâmica molecular de líquidos, até mecanismos de reações. Dois dos docentes desenvolvem pesquisas experimentais na área de físico-química de superfícies e interfaces de macromoléculas. Para citação e análise, com o cuidado de preservar a identidade, todos foram identificados de forma aleatória de P1 a P11.

Foi utilizado como instrumento de pesquisa, entrevistas semiestruturadas com os pesquisadores, tal instrumento permite certa organização das questões a serem abordadas, por meio de um roteiro com as informações pertinentes ao estudo (Apêndice B), sempre observando a questão de pesquisa que conduz o trabalho. As questões presentes no roteiro foram organizadas nos itens, com seus respectivos tópicos: 6.3.1. O tema na pesquisa do entrevistado; 6.3.2. A estrutura do tema; 6.3.3. O tema nas disciplinas ministradas; 6.3.4. O tema no currículo.

Logo após, foi realizada a transcrição das entrevistas para auxiliar no processo de categorização e análise de conteúdo. Após leitura e releituras das transcrições, os textos foram separados em categorias previamente pensadas durante a elaboração das questões.

A categoria presente no item 6.3.2. foi considerada a mais importante do trabalho por proporcionar o elenco das principais ideias dos especialistas em relação às interações intermoleculares, por conseguinte, foram necessárias subcategorias concernentes às ramificações da estrutura do tema:

i) Como o professor vislumbra o tema interações intermoleculares na química de uma maneira geral;

ii) Quais são os conceitos fundamentais sobre o tema e os dados/fatos e princípios que emergem das respostas;

iii) Quais as principais ideias que um egresso da graduação em química deve compreender referentes ao tema.

Assim, a partir das transcrições das entrevistas foram elaboradas fichas de análise com base nos conteúdos conceituais, exploradas pelas categorias (i), (ii) e (iii), em que cada dado/fato, conceito ou princípio em destaque na entrevista, foi separado em um campo da ficha, o contexto da entrevista em que ele está inserido, outros conceitos que estão relacionados com o mesmo baseado no que emergiu das respostas dos pesquisadores.

Uma codificação numérica foi criada para identificação do trecho selecionado no texto de transcrição da entrevista. Essas fichas foram analisadas por outro pesquisador para avaliar e discutir especialmente a classificação dos termos e/ou passagens da entrevista como dado/fato, conceito ou princípio. Um recorte da ficha de análise da entrevista com P1 é apresentado no (quadro 4).

Quadro 4 - Recorte da ficha de análise da entrevista com o especialista P1 a partir dos conteúdos conceituais.

<b>Dados/fatos</b>	<b>Excerto</b>	<b>Conceitos</b>	<b>Código</b>
<b>Célula</b>	<i>“...o funcionamento da célula depende de interações intermoleculares...”</i>	Interações intermoleculares	(1)
<b>Conceitos</b>	<b>Excerto</b>	<b>Conceitos</b>	<b>Código</b>
<b>Interações de van der Waals</b>	<i>“...raio atômico é importante porque na hora em que você vai discutir interações de van der Waals, você vai acabar falando em tamanho de átomos ou você vai discutir polarizabilidade que tem certa correlação com o tamanho dos átomos...”</i>	raio atômico tamanho dos átomos polarizabilidade	(12)
<b>Princípios</b>	<b>Excerto</b>	<b>Conceitos</b>	<b>Código</b>
<b>Visão molecular</b>	<i>“...eu acho que o químico tem que ter uma interpretação mais molecular e, até atômica dos fenômenos...”</i>	químico molecular/atômica fenômenos	(4)

Fonte: autoria própria.

Em seguida, a partir das fichas de análise foram elaborados mapas conceituais, no sentido de sintetizar as principais concepções dos entrevistados através de proposições, que nos mapas são representados pelos conceitos, interligados por uma frase de ligação, que é codificada como na ficha de análise para identificar o contexto em que foi retirada da entrevista.

O mapa conceitual é utilizado como uma ferramenta para demonstrar os conceitos considerados fundamentais sobre as interações intermoleculares por cada entrevistado e, também revelar como os especialistas correlacionam tais conceitos.

Para que fique mais bem compreendida a metodologia utilizada na análise das entrevistas, as seguintes etapas dessa parte da pesquisa foram as seguintes:

- ✓ Entrevistas semiestruturadas com especialistas sobre o tema;
- ✓ Transcrição, leitura e análise de conteúdo das entrevistas;
- ✓ Classificação das respostas nas categorias pré-definidas do item 6.3.1. ao 6.3.4.;
- ✓ Discussão com ênfase nos conceitos e ideias-chave que emergem das entrevistas;
- ✓ Análise a partir dos conteúdos conceituais e elaboração de quadro com os principais dados/fatos, conceitos e princípios.
- ✓ Construção de mapas conceituais que revele as relações entre os conceitos.

Outras formas de explorar os resultados foram utilizadas e não constam nas etapas da metodologia, como a elaboração de nuvens de palavras com os conceitos e fenômenos físico-químicos mais citados pela maioria dos especialistas e quadros com o resumo dos principais dados/fatos, conceitos e princípios relacionados ao tema nas concepções de cada um dos entrevistados.

Sendo a estrutura do tema, o tópico mais investigado na análise da categoria (item 6.3.2), para (i), foram extraídos trechos das respostas dos pesquisadores sobre qual a importância do tema interações intermoleculares no conhecimento químico.

Para (ii), nuvens de palavras sintetizam os conceitos centrais e fenômenos sugeridos de cada entrevista, além dos mais frequentes no conjunto das análises.

No (iii), foi possível inferir e elencar as principais ideias que devem ser entendidas por um químico, através das concepções dos pesquisadores, no contexto das questões referentes à estrutura conceitual do tema interações intermoleculares.

O percurso metodológico apresenta de forma sucinta, a metodologia baseada em uma pesquisa qualitativa, centrada na análise de entrevistas com especialistas,



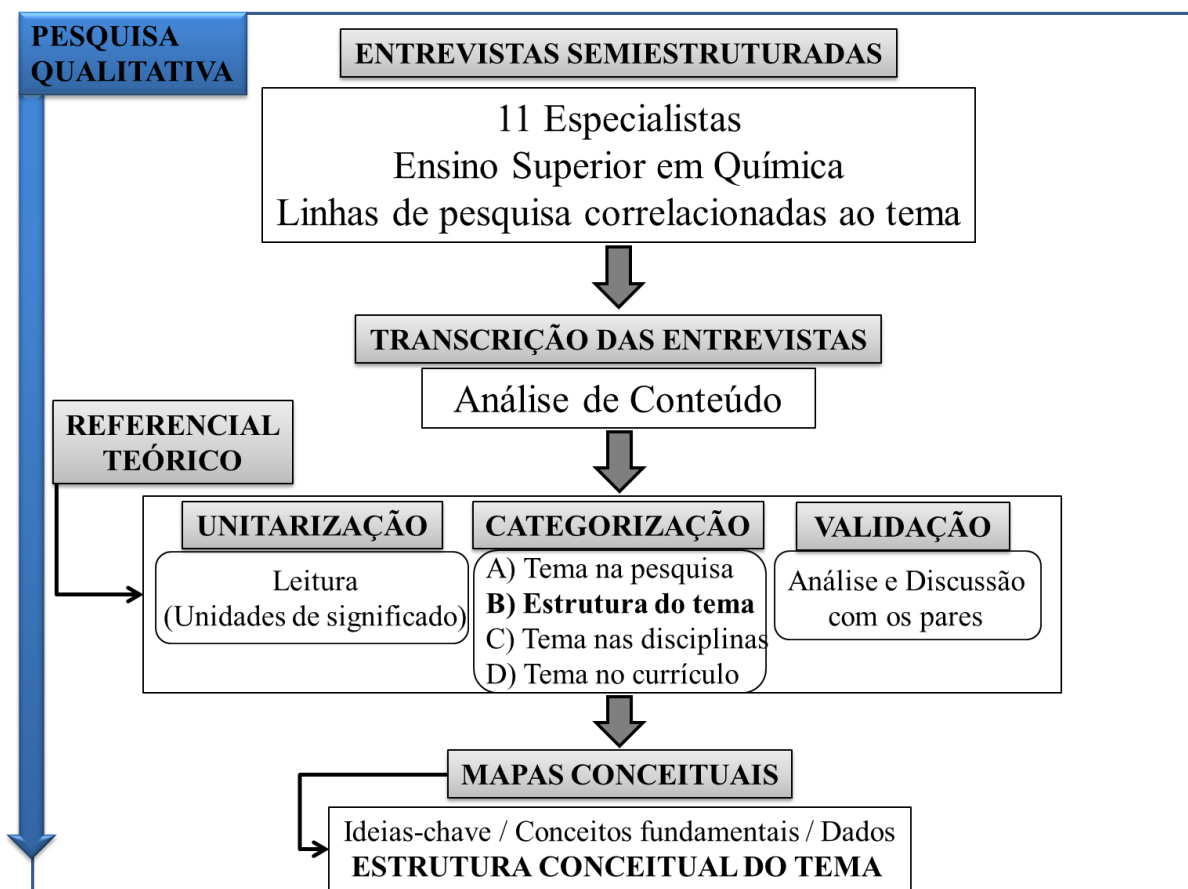
que atuam no Ensino Superior em Química e tem suas linhas de pesquisa correlacionadas com o tema investigado.

É importante lembrar, que a análise de conteúdo foi realizada seguindo as etapas de unitarização, categorização e validação com base nos conteúdos conceituais, visando obter a estrutura conceitual do tema. O roteiro da entrevista foi elaborado também com esse fim, sendo as questões formuladas com base em pesquisas anteriores do grupo de pesquisa, acerca do tema na graduação em química.

Em seguida, foi utilizada uma ferramenta que visa elaborar um mapa conceitual a partir de textos transcritos das entrevistas (JUNQUEIRA e MAXIMIANO, 2020). A ferramenta de análise consiste em: 1) Seleção dos fragmentos dos textos a serem convertidos; 2) Seleção dos conceitos, considerando os que são fundamentais ao tema ou os que aparecem em grande frequência no texto; 3) Estabelecimento dos conceitos que aparecem relacionados e redação de uma frase de ligação que sintetize e represente essa relação, feita através de leitura e releituras atentas dos fragmentos selecionados e, 4) Construção do mapa conceitual utilizando o software CMap Tools ® (CAÑAS *et al.*, 2004).

A (figura 10 apresenta o fluxograma, que sintetiza o percurso metodológico da análise das entrevistas. Uma das fichas de análise das entrevistas, com base nos conteúdos conceituais pode ser consultada no Apêndice C.

Figura 10 - Desenho da pesquisa com etapas da análise das entrevistas com especialistas sobre Interações Intermoleculares.



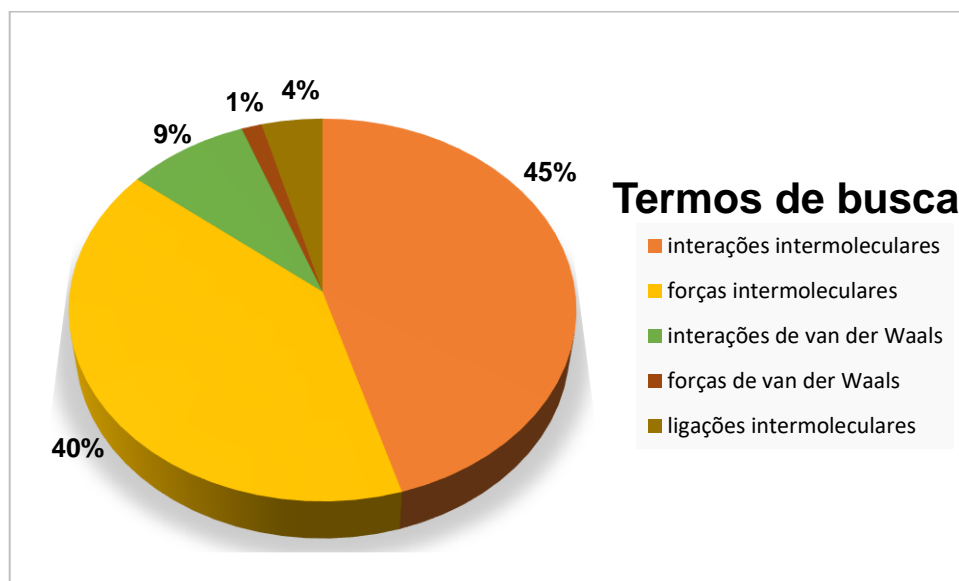
Fonte: autoria própria.

## 6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 6.1 Pesquisa Bibliográfica

A maioria dos artigos selecionados (acima de 80 %) foram obtidos utilizando os termos de busca *interações intermoleculares* e *forças intermoleculares* (figura 11). O termo “*ligações intermoleculares*” também foi utilizado por observarmos que tal, surge em alguns estudos ao tratar das diferenças entre ligações químicas x interações intermoleculares como ligações intramoleculares x intermoleculares, porém foi pequena a quantidade de artigos selecionados a partir dessa palavra-chave.

Figura 11 - Quantidade de trabalhos selecionados para os diferentes termos de busca.



Fonte: autoria própria.

Mesmo com o cuidado na utilização de filtros, muitos dos 246 artigos selecionados foram arquivados na categoria *pesquisas em geral*, após a leitura cuidadosa verificou-se que tais publicações não contemplavam os principais objetivos da investigação, em especial pelo enfoque dado a outros conteúdos do conhecimento químico e o não aprofundamento no tema interações intermoleculares e conceitos correlacionados, em vista disso, os trabalhos selecionados foram reduzidos a 141 publicações.

Tais artigos podem ser caracterizados em consonância com os objetivos desta pesquisa, que primeiramente está centrado nos conceitos, em seguida nos aspectos relacionados à aprendizagem e, também nas propostas para abordar o tema. Tais artigos selecionados, foram representados por 42 que correspondiam à JCE, 13 à EQ, 24 à CERP, 12 à QN e 50 a outras revistas.

Como não houve um critério sobre um período específico estabelecido para a seleção dos trabalhos, torna-se fundamental observar através do gráfico, as variações das quantidades de publicações ao longo dos anos, até meados de 2019. A (figura 12) mostra o número de artigos relacionados ao tema, em cada ano, somente para as categorias escolhidas anteriormente e foram objeto de investigação da tese.

Figura 12 - Distribuição dos artigos selecionados de 1938 a 2019.

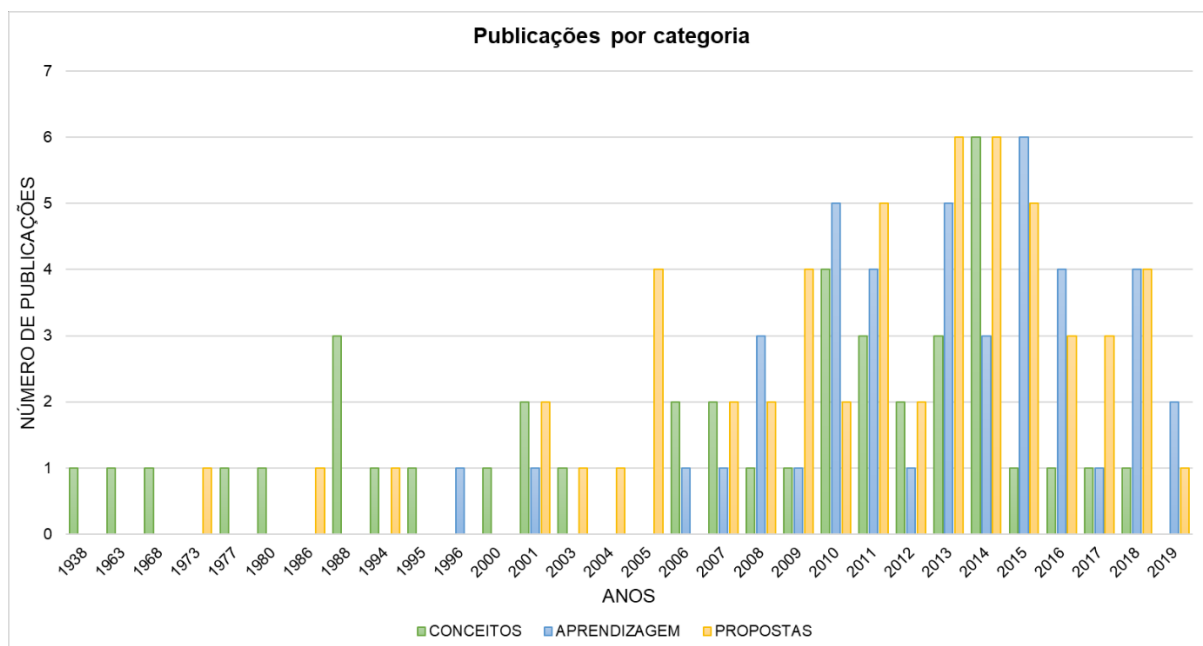


Fonte: autoria própria.

O período em que se inicia mais trabalhos sobre as interações intermoleculares na perspectiva do ensino de química se situa a partir de 2007, sendo o ano de 2014 com o maior índice de publicações acerca do tema. Embora, com exceção do ano de 2012, esse período (2010 - 2015) concentra a publicação de mais de dez artigos sobre as interações intermoleculares. Um dos fatores que pode ser atribuído ao aumento das publicações a partir de 2000, é o surgimento de revistas voltadas a área de educação química, como a EQ em 1989 e a CERP em 2000.

Até o ano 2000 é possível perceber um domínio de artigos classificados na categoria *Conceitos* e a partir desse ano há um aumento de publicações que tratam das dificuldades de aprendizagem e de propostas metodológicas que são também organizadas em categorias definidas anteriormente (figura 13). A distribuição dos 141 artigos selecionados das três categorias iniciais de análise e nos principais periódicos analisados é apresentada na (tabela 2).

Figura 13 - Quantidade de publicações nas diferentes categorias ao longo dos anos.



Fonte: autoria própria.

Tabela 2 - Quantitativo de artigos selecionados nas diferentes revistas científicas.

REVISTAS CIENTÍFICAS PESQUISADAS				
Revistas/Categorias	Conceitos	Aprendizagem	Propostas	Total
CERP	04	19	01	24
EQ	03	06	04	13
JCE	12	09	21	42
QN	05	01	06	12
Outras Revistas	18	08	24	50
<b>Total</b>	<b>42</b>	<b>43</b>	<b>56</b>	<b>141</b>

Fonte: autoria própria.

Os artigos da categoria de *Conceitos* compreende publicações que abordam ideias relacionadas ao início das discussões sobre as interações intermoleculares através da equação de van der Waals, aspectos sobre a energia de interação calculada através de equações de Coulomb com parâmetros moleculares e correlacionada com as distâncias intermoleculares para cada tipo de interação, muitas discussões que evidenciam a importância das interações dispersivas no contexto das interações intermoleculares, especialmente seu caráter universal e aditivo. Outro conteúdo bem explorado nos artigos da categoria *Conceitos*, é a ligação de

hidrogênio, quão fundamental é o entendimento dos valores típicos do ângulo e comprimento de ligação, além de discussões sobre a decomposição da energia da ligação de hidrogênio, como também, sobre seu caráter covalente. Por fim, muitas publicações exibem a relação intrínseca entre as interações intermoleculares e inúmeras propriedades físico-químicas dos compostos químicos, as explicações de tais propriedades demandam fortemente da compreensão das interações.

Os trabalhos classificados na categoria de *Aprendizagem*, fundamentalmente discutem as dificuldades e concepções alternativas de estudantes sobre as interações intermoleculares. A relação entre estrutura e propriedade é muito presente nesses artigos e envolve discussões sobre quais características podem ou não influenciar as propriedades das substâncias químicas, em especial, as que tratam da distribuição de cargas nas estruturas moleculares. Muitos desses trabalhos são baseados em testes, entrevistas e outros instrumentos que avaliam a representação e/ou interpretação de fenômenos como dissolução, mudanças de estado e misturas, com base nas interações entre as espécies químicas presentes nos sistemas investigados. Dentre as principais dificuldades apontadas estão aquelas, que apontam principalmente confusões entre ligação química e interação intermolecular, previsão de pontos de ebulição de compostos e o não reconhecimento das interações intermoleculares existentes em determinados sistemas.

Já as publicações envolvendo as *Propostas metodológicas* para ensino do tema consiste principalmente em trabalhos que sugerem o uso de softwares com base de dados de estruturas, simulações e animações interativas para auxiliar na aprendizagem das interações. Boa parte das propostas apresentam também como enfoque o uso de atividades práticas experimentais que proporcionam maior aprofundamento em relação às interações intermoleculares, cromatografia, propriedades de excesso, tensão superficial e solubilidade de compostos em água que são, portanto, alguns dos fenômenos relacionados ao tema que se destacam nas distintas propostas.

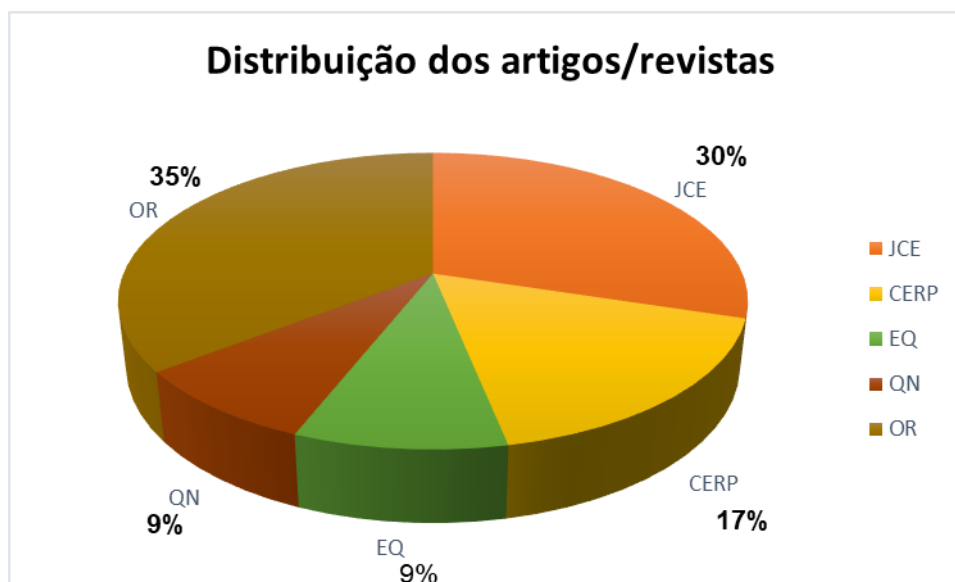
Todos os 141 artigos são provenientes das quatro bases de dados aqui definidas, a maior parte dos artigos (65%) foram publicados nas quatro revistas escolhidas como destaque para a presente pesquisa bibliográfica, isso evidencia que a opção pela pesquisa em tais periódicos foi consideravelmente adequada (Figura 14). Destas, a maior parte da produção científica sobre o tema é oriunda do *Journal of Chemical Education* (JCE). Essa revista apresenta uma característica peculiar, pois

reúne trabalhos de pesquisadores de diversas áreas da ciência que buscam vincular temas específicos ao processo de ensino de química, por exemplo, há propostas de ensino de conteúdos de físico-química, analítica, orgânica, etc. O segundo periódico de onde foram selecionados mais trabalhos é a *Chemistry Education Research and Practice* (CERP). Esta publicação já é mais específica contendo trabalhos que são organizados por pesquisadores da área de ensino de química ou a estrutura das publicações seguem padrões da pesquisa em ensino de ciências, especialmente com metodologias e referenciais teóricos do campo da educação.

A revista QN que inicia suas publicações em 1978 e apresenta artigos relacionados ao ensino desde seu primeiro número, mas apenas em 1980, precisamente no número dois do terceiro volume, há uma seção da revista intitulada “Educação” para publicação de artigos voltados ao ensino de química.

Educação Química (EQ), uma revista acadêmica que aborda trabalhos das ciências naturais e da educação química, em especial da América Latina. Sua criação foi promovida pela Faculdade de Química da Universidade Nacional Autônoma do México.

Figura 14 - Distribuição dos trabalhos selecionados sobre interações intermoleculares nas revistas da área de ensino de química.



Fonte: autoria própria.

Os outros 35% restantes foram obtidos de outros vinte e sete periódicos diferentes tanto da área da educação em ciências (doze periódicos), como da própria

química ou física, sendo a maioria destas da área de físico-química, como o *Journal of Physical Chemistry A, B, C* e o *The Journal of Physical Chemistry Letters*. Destas a maior contribuição foi do *The Journal of Physical Chemistry B* (JPCB) de onde foram selecionados seis artigos (Tabela 3) e do *Journal of the American Chemical Society* (JACS) com cinco trabalhos.

Tabela 3 - Distribuição dos trabalhos em diferentes revistas científicas.

Revistas	Nº de Trabalhos
<i>International Journal of Science Education (IJSE)</i>	1
<i>International Journal of Science and Mathematics Education (IJSME)</i>	1
<i>Journal of Education and Training Studies (JETS)</i>	1
<i>Journal of Research in Science Teaching (JRST)</i>	1
<i>National Association for Research in Science Teaching (NARST)</i>	1
<i>Research in Science and Technological Education (RSTE)</i>	1
American Journal of Physics (AJP)	3
European Journal of Physics (EJP)	3
The Journal of Physical Chemistry B (JPCB)	6
Journal of the American Chemical Society (JACS)	5
Journal of Chemical Theory and Computation (JCTC)	1
Wires Computational Molecular Science (WIREs)	1
<i>Journal of Science Education and Technology (JSET)</i>	1
Journal of the Brazilian Chemical Society (JBACS)	2
Ciencia e Ingeniería Neogranadina (CIN)	1
Formación Universitaria (FU)	1
<i>Revista Brasileira de Ensino de Física (RBEF)</i>	2
Chemical Reviews (CR)	2
The Journal of Physical Chemistry Letters (JPCL)	2
The Journal of Physical Chemistry (JPC)	3
The Journal of Physical Chemistry A (JPCA)	3
The Journal of Physical Chemistry C (JPCC)	1
<i>Educational research (ER)</i>	1
<i>Innovación Didáctica (ID)</i>	1
<i>Research in Science Education (RSE)</i>	1
<i>Journal of Biochemistry Education (JBE)</i>	1
South African Journal of Chemistry (SAJC)	3
Total	50

Fonte: autoria própria.

Os dados também revelam que o país com maior número de trabalhos é o EUA, com 37% das produções, seguido do Brasil com 16%, Turquia representado 4%, México e China com 3,5% e mais 23 países cujas publicações não atingem 3% do total de artigos. O fato de a maior parcela das pesquisas apresentadas nessas revistas serem representadas pelo EUA, pode ser reflexo do protagonismo do país na



produção científica mundial. Já o destaque do Brasil se dá pela escolha, aqui, em incluir tanto uma base de dados (SciELO) como uma das revistas locais (QN).

A contribuição do México em publicações selecionadas para a pesquisa destoa da tendência de países com maiores produtividades a nível mundial. Isso pode ser justificado devido a uma das revistas consultadas, *Educación Química*, que é uma revista com caráter internacional que aborda temas no âmbito do ensino de química e que publica trimestralmente pela Faculdade de Química da Universidade Nacional Autônoma do México (UNAM). Além de uma das bases de dados utilizada, SciELO, que abrange, principalmente periódicos da América Latina.

A resposta para a questão de pesquisa que norteia este trabalho está centrada na categoria de *Conceitos*, em que as principais ideias foram levantadas com o intuito de organizar a estrutura de conceitos fundamentais para a compreensão das interações intermoleculares e esse aspecto inicia com a não fragmentação das interações já no sistema de pesquisa, a busca pelo tema pensada de forma unificada como já foi descrito.

Após leitura e análise dos trabalhos selecionados em tal categoria, que é representada por 42 artigos reunidos em revistas diferentes. Foi possível elencar os conceitos fundamentais, ideias-chave e projetar uma organização desse conhecimento na graduação em química, sempre pensando em responder: *O que um químico deve saber sobre as interações intermoleculares?*

Vale ressaltar que nas demais categorias também estão inseridos muitos conceitos fundamentais relacionados ao tema, o critério de depuração ao destinar o trabalho selecionado na categoria *Conceitos*, foi observar se o artigo se fundamenta em aspectos teóricos e não tem como foco tanto o processo de ensino e aprendizagem quanto proposições metodológicas para o ensino das interações intermoleculares.

No (quadro 5) foi possível elencar os conceitos fundamentais a partir das fichas de análise dos artigos que constituem a categoria *Conceitos*, em um campo dedicado aos conceitos em destaque. Antes de qualquer análise mais aprofundada, a compreensão do que é fundamental no contexto das interações intermoleculares passa pelo entendimento dos principais conceitos que formam o tema.

Quadro 5 - Principais conceitos emergentes da análise dos artigos selecionados, conceitos que apareceram ao menos em dois trabalhos distintos.

Ideia-chave	n. de artigos	Conceitos centrais	Artigos que citam o conceito	Artigo correspondente (*Id do artigo)
Energia de Interação	16	Origem e natureza das interações	6	3, 4, 10, 11, 17, 39.
		Euações	12	3, 4, 9, 10, 11, 19, 22, 24, 27, 31, 32, 37.
		Potencial de Lennard-Jones	6	3, 6, 11, 22, 37, 39.
		Decomposição da energia	9	1, 9, 10, 23, 24, 27, 31, 32, 37.
Interações dispersivas	20	Polarizabilidade	14	2, 4, 9, 10, 11, 12, 16, 19, 28, 29, 30, 31, 32, 42.
		Caráter universal	6	11, 12, 17, 19, 26, 42.
		Caráter aditivo	10	2, 11, 12, 16, 19, 26, 28, 29, 32, 42.
		Nuvem eletrônica	7	1, 3, 9, 17, 19, 30, 42.
		Propriedades	5	2, 19, 38, 40, 42.
Ligações de Hidrogênio	22	Interação eletrostática	5	2, 5, 7, 34, 37.
		Caráter covalente	4	5, 7, 34, 37.
		Energia da ligação	15	2, 5, 6, 16, 17, 19, 20, 23, 24, 26, 27, 28, 31, 34, 37.
		Distância e ângulo típicos	7	9, 17, 23, 24, 28, 32, 37.
		Fenômenos	9	2, 15, 16, 18, 19, 20, 36, 38, 40.
Equação de van der Waals	8	Interações atrativas e repulsivas	6	3, 11, 13, 17, 30, 41.
		Parâmetros a e b	8	3, 11, 13, 17, 22, 30, 39, 41.
		Gases ideais	7	3, 11, 13, 17, 30, 39, 41.
Propriedades	14	Ponto de ebulição	6	2, 15, 16, 17, 19, 40.
		Solubilidade	3	17, 18, 38.
		Tensão superficial	6	12, 13, 17, 26, 32, 40.
		Viscosidade	2	17, 40.
		Entalpia de vaporização	3	19, 20, 25.

\*artigos elencados no APÊNDICE D.

Fonte: autoria própria.

Foram escolhidas ideias-chave (quadro 5) que pudessem abranger os conceitos fundamentais que emergiram da análise das publicações para elaboração de um texto que enfatize as conexões entre tais conceitos. Lembrando que a estrutura de conhecimento sobre o tema tem como base as ideias centrais, conceitos, parâmetros e como eles se relacionam.

É importante entender que essas ideias-chave representam também um conceito e com maior capacidade de estabelecer relações com os demais conceitos, exercendo certa centralidade na abordagem do tema. Porém, essa ideia-chave não necessariamente é o principal aspecto abordado num determinado artigo, nestes casos ela pode ser apenas citada no artigo.

O conteúdo da pesquisa bibliográfica a respeito presente nos artigos que compõem a categoria *Conceitos*, é apresentado a seguir em tópicos organizados pelas principais ideias-chave: *Energia de Interação Intermolecular, Interações Dispersivas, Ligação de Hidrogênio, Equação de van der Waals e Propriedades Físico-Químicas*. O propósito do texto é apresentar os conceitos fundamentais da análise da literatura, e quais as relações estabelecidas entre esses conceitos. Ao final de cada texto há um esquema que sintetiza os principais achados do ponto de vista conceitual.

Não houve aqui a preocupação de que os tópicos investigados sobre as interações intermoleculares apresentem uma sequência de ensino comumente exibida em livros didáticos. A estrutura conceitual corresponde mais ao que emergiu da análise dos trabalhos selecionados e das concepções baseadas em estudos do nosso grupo de pesquisa.

### **6.1.1 Energia de interação**

A energia de interação é um dos principais fatores responsáveis pela classificação das interações como covalentes e não covalentes, uma vez que as magnitudes de energia envolvida em tais interações são divergentes.

Entre o que emergiu da análise dos artigos selecionados, é possível apresentar os principais conceitos tratados em torno da energia de interação como ideia-chave. Desde equações matemáticas para cálculo da energia até o potencial de interações atrativas e repulsivas em função da separação entre as moléculas.

As interações intermoleculares podem ser divididas em interações do tipo atrativas e repulsivas. As interações atrativas são representadas pelas forças de orientação, indução e dispersão, sendo os parâmetros: momento de dipolo e polarizabilidade. Estes são fundamentais na caracterização dos sistemas moleculares. Já as interações repulsivas, podem ser compreendidas de forma plena,

a partir de alguns conceitos da química quântica, como: sobreposição de nuvens eletrônicas e repulsão de *spin*. No entanto, uma noção básica e até mesmo superficial destes conceitos é suficiente, não sendo necessário, um grande aprofundamento em aspectos da química quântica.

Muitos trabalhos também discutem o uso de cálculos quânticos e simulação computacional para determinação da energia de interação, considerando todas as contribuições atrativas e repulsivas em um sistema molecular.

Desde já, é importante ressaltar, que a origem da equação utilizada para calcular a energia de cada tipo de interação intermolecular, em especial as atrativas, alguns parâmetros moleculares são evidenciados. Tal modelo de equação, sob a perspectiva de eletrostática clássica, é baseado na interação coulômbica entre duas cargas, lembrando que as moléculas podem ser consideradas resultado da distribuição espacial de cargas elétricas.

Outro aspecto que pode ser proporcionado pelo uso de equações de energia de interação, é a compreensão de que várias interações intermoleculares podem estar atuando no mesmo sistema. Há muitos materiais de ensino em que a energia de interação é apresentada de maneira segmentada, com cálculos de energia potencial para cada tipo de interação em equações independentes, sob a perspectiva do ensino de química, esse tipo de abordagem contribui para uma concepção classificatória das interações intermoleculares.

A equação quando representada por uma somatória de termos distintos, pode ser uma forma de unificar todas as interações intermoleculares atrativas, além de enfatizar um ponto importante que é a aditividade das forças de dispersão e dipolo-dipolo.

Fica evidente em tais equações que os parâmetros moleculares como momento de dipolo e polarizabilidade apresentam uma relação de proporcionalidade com a energia total de interação. Também é possível observar que o potencial energético mostra dependência da separação entre as moléculas, semelhante para os diferentes tipos de forças atrativas,  $1/r^6$ .

Entre os trabalhos que foram investigados, a energia de interação é abordada, tanto com intuito de demonstrar esse aspecto de união entre os modelos de interações, quanto apresentar diferentes formas de calcular as energias de interações, com base em química quântica e através de programas computacionais.

Através da seleção e elaboração das fichas de análise, de antemão foi possível elencar alguns conceitos vinculados à energia de interação que foram abordados: unificação das forças, interações atrativas e repulsivas, decomposição da energia de interação, equação para quantificar a energia de interação, potencial de Lennard-Jones, distância  $1/r$ , etc.

Ao propor a correlação entre pontos de ebulição e número de elétrons como uma aproximação da polarizabilidade, Glazier, Marano e Eisen (2010) argumentam que a única forma para dados inteiramente precisos, é avaliar os pontos de ebulição como uma função da energia de interação molecular total.

Para isso, as autoras exploram a equação, que possui três termos de contribuição, o primeiro termo corresponde às interações atrativas do tipo dipolo-dipolo, o segundo às forças de dispersão e o terceiro às forças de indução. Essa equação representa as energias envolvidas nas interações intermoleculares entre duas moléculas idênticas, mas também pode ser aplicada a interações entre moléculas distintas.

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

Fonte: Glazier, Marano e Eisen (2010), p. 1336.

Onde  $r$  é a distância entre duas moléculas iguais,  $\alpha$  é a polarizabilidade molecular que depende do número e arranjo dos elétrons,  $\mu$  é o momento de dipolo molecular,  $h\nu_0$  é a energia do ponto zero que pode ser aproximado pela energia de ionização,  $k_B$  é a constante de Boltzmann, e  $T$  é a temperatura.

Considerando que através da equação é possível obter, para as interações intermoleculares atrativas, a energia de interação total, logo, no cálculo dessa energia de interação total entre moléculas polares, haverá contribuições dos três termos da equação, já entre moléculas apolares, apenas o segundo termo é considerado.

Observando a equação, mesmo para moléculas polares pode-se notar as contribuições energéticas de cada interação. Esse exemplo denota de forma implícita talvez, um dos objetivos da equação de energia de interação, que a maior contribuição de energia, não tem dependência exclusiva da polaridade da molécula.

Em relação a maior contribuição das forças dispersivas, diferentes autores as apontam como representantes seguras das forças intermoleculares exercidas nas moléculas presentes em um sistema, justamente por essa característica diante da

energia de interação total. Afirmando que esse tipo de interação tem caráter dominante em relação a outros, no que tange à energia de interação total (FOWKES, 1963; PADDAY; UFFINDELL, 1968; OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Sob a perspectiva do ensino das interações intermoleculares, considerando que uma das funções da equação é também quantificar a energia de interação. A maioria dos estudantes não afirmaria que as forças dispersivas representam a maior contribuição energética das interações entre moléculas polares, o que acontece em alguns casos e, isso também está relacionado ao não reconhecimento de mais de um tipo de interação em um sistema molecular.

Essa informação é essencial do ponto de vista do ensino das interações intermoleculares, por destacar que, em sistemas moleculares há uma resultante de diferentes contribuições, que nem sempre está relacionada com a polaridade e evidencia que tais conceitos não estão completamente difundidos nos livros didáticos, visto que a maioria dos materiais didáticos enfatiza o tipo de interação principal, por exemplo, a interação dipolo-dipolo entre moléculas de HCl, são mais destacadas que as interações dipolo-dipolo induzido e dipolo induzido-dipolo induzido também presentes.

Uma das hipóteses que pode estar relacionada com essa concepção é a reprodução de tabelas com os valores típicos de energia para cada tipo de interação. Jasien (2008) discute essa situação e apresenta um exemplo desse tipo de tabela (tabela 4) que pode facilmente levar a um equívoco baseado no raciocínio perfeitamente lógico.

Tabela 4 - Representação típica de livros didáticos ilustrando a Força das Interações Intermoleculares

<b>Interação</b>	<b>Energia/(kJmol<sup>-1</sup>)</b>
Dispersão	1 – 10
Dipolo-Dipolo	3 – 4
Ligação de Hidrogênio	10 – 40

Fonte: Jasien (2008), p. 1222.

O valor energético de algumas interações e os dados na tabela parece implicar ser impossível para uma molécula apolar com apenas forças dispersivas e uma molécula polar com ligações de hidrogênio, terem interações intermoleculares de mesma intensidade.

Mesmo que o foco da argumentação de Jasien (2008), seja mostrar esse aspecto entre a ligação de hidrogênio tida como muito forte em relação às outras interações. Ao citar um exemplo, onde os alunos são questionados sobre o ponto de ebulição de diferentes compostos, muitos classificaram as interações dispersivas como “fracas”, para justificar o fato de julgarem o composto apolar com ponto de ebulição menor que o de uma substância polar.

Murthy (2006), ao apresentar uma tabela com a natureza das interações não covalentes fracas, afirma que as forças de dispersão são as que mais contribuem para interações não covalentes, salvo em moléculas pequenas e altamente polares.

Esse aspecto de abordagem em relação às interações intermoleculares, de apresentar a energia de interação e as respectivas contribuições de cada tipo de interação em uma equação, torna-se importante, à medida que evita uma visão fragmentada e novamente evidencia a ideia de diferentes interações atuantes num dado sistema molecular.

As publicações em seguida enfatizam essa característica, demonstrando que o conhecimento pleno da equação de energia de interação total das forças atrativas, que considera também a contribuição das interações dispersivas, só foi elucidado tendo como base a mecânica quântica.

Outro trabalho que trata da energia de interação a partir de equações e apresenta conceitos importantes a respeito do tema é o de Farina *et al.* (2013). O autor retrata que as interações atrativas são também denominadas de *forças de van der Waals*, que podem ser diferenciadas por três tipos de forças: forças de orientação, forças de indução e as forças dispersivas.

As forças de orientação que ocorrem entre duas moléculas com dipolos permanentes e as forças de indução que acontecem entre uma molécula apolar polarizável e outra com dipolo permanente são representadas pelas equações abaixo:

$$U_{or}(r) = -\frac{2\mu_1^2\mu_2^2}{3k_B T(4\pi\epsilon_0)^2 r^6} \quad U_{ind}(r) = -\frac{\alpha_2\mu_1^2}{r^6}$$

Fonte: Farina *et al.* (2013), p. 366.

De acordo com Farina *et al.* (2013), os dois tipos de equações acima para as forças de van der Waals, não conseguem explicar a atração entre dois átomos ou moléculas apolares. Tal explicação para este tipo de força, segundo os autores, teve que esperar pelo advento da mecânica quântica.

Segundo os autores, devido às flutuações quânticas, as distribuições de carga e corrente em um átomo oscilam, por conseguinte, os dipolos instantâneos são formados e dão origem a uma interação eletromagnética. Essas flutuações estão relacionadas com o princípio da incerteza de Heisenberg (FARINA *et al.*, 2013).

Murthy (2006), ao detalhar em uma tabela, a natureza das interações não covalentes, também descreve as forças dispersivas como interações atrativas entre cargas flutuantes.

Através de um esquema da mecânica quântica, a correlação entre a energia de interação entre átomos e a polarizabilidade deu origem a equação para o cálculo do potencial de interação dispersiva, assim como descreve Farina *et al.* (2013).

Em 1930, Eisenschitz e London consideraram a interação entre dois átomos de hidrogênio em detalhe. Depois de usar um método perturbativo simples, eles relacionaram o potencial de interação entre os átomos diretamente com a polarizabilidade atômica do hidrogênio. Como a polarizabilidade dinâmica  $\alpha(\omega)$  está relacionada com a permissividade  $\epsilon(\omega)$ , estas forças foram chamadas por London de forças de dispersão de van der Waals.

E essa energia de interações dispersivas entre dois átomos pode ser escrita:

$$U_{disp}(r) = -\frac{3}{4} \frac{h\omega_0\alpha_0^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 r^6}$$

Fonte: Farina *et al.* (2013), p. 367.

Onde  $\omega_0$  é a frequência de transição dominante da interação e  $\alpha_0$  é a polarizabilidade estática dos átomos. Apesar de o trabalho citado, ter como objetivo apresentar um método no cálculo das *forças de van der Waals* entre um átomo e uma superfície condutora, levanta aspectos históricos e conceituais importantes referentes à energia de interação.

Em muitos trabalhos e livros didáticos, não fica claro que a origem da equação de energia de interação para as forças dispersivas é baseada em um método da mecânica quântica e que não pode ser descrita pela eletrostática clássica como as demais interações *de van der Waals*.

É importante ressaltar, que a ideia não é defender o domínio da mecânica quântica para a compreensão das forças dispersivas e consequente interações intermoleculares, mas compreender, que essa relação do parâmetro molecular polarizabilidade com as forças dispersivas, tem suporte em um método mecânico-quântico.



Taddei *et al.* (2010), relata que Eisenschitz e London demonstraram como calcular a energia de interação das forças dispersivas através da realização de uma teoria de perturbação de segunda ordem, em um sistema quântico composto de dois átomos.

O aspecto histórico com conteúdo científico, de evidenciar quais ferramentas teóricas que Eisenschitz e London utilizaram, do ponto de vista do ensino, possibilita o entendimento de outros modelos alternativos, que busquem racionalizar a energia das interações dispersivas.

Cada vez mais, as tecnologias e ferramentas computacionais, contribuem na otimização de processos de caráter quantitativo. Com a energia de interação não difere, softwares têm exercido papel fundamental nas investigações desse parâmetro.

Os trabalhos que buscaram diferentes formas de quantificar a energia de interação total e suas contribuições, com base em mecânica quântica e softwares específicos, utilizaram com frequência o termo “análise de decomposição de energia”, característico dessa área de pesquisa.

Considerando o enfoque do presente estudo, esses trabalhos não foram amplamente discutidos, pois, os principais conceitos estão relacionados à química teórica e computacional. No entanto, com o intuito de demonstrar as características desses trabalhos, apenas um dos artigos analisados será aqui apresentado, com ênfase nos conteúdos conceituais que podem auxiliar na aprendizagem do tema.

No trabalho de Oliveira e Araújo (2012), foi descrito que na década de 60, um estudo minucioso foi realizado, sobre os parâmetros a serem considerados na formação de um sistema intermolecular. E o potencial intermolecular  $U$  foi descrito pela equação:

$$U = E_C + E_{Ex} + E_{Pol} + E_{TC} + E_D$$

Onde  $E_C$  é a energia eletrostática de natureza atrativa ou repulsiva, relacionada aos momentos multipolares,  $E_{Ex}$  corresponde a energia de repulsão entre os *spins* nos orbitais na região de *overlap*,  $E_{Pol}$ , a energia de distorção dipolo-dipolo induzido da distribuição eletrônica,  $E_{TC}$  significa que a energia derivada da transferência de carga entre os orbitais moleculares de fronteira e  $E_D$ , que é o termo de energia proveniente das forças de dispersão de London.

Esse trabalho selecionado a partir da pesquisa bibliográfica, relacionado à química teórica e com ênfase em modelos quântico-computacionais, exhibe a possibilidade de tais aspectos serem explorados do ponto de vista didático, para

ressaltar o reconhecimento de mais de um tipo de interação em sistemas moleculares e o caráter aditivo das interações, além da correlação fundamental com as distâncias intermoleculares.

Como em alguns momentos, a distância foi colocada como um fator que também diferencia os tipos de interação e tem correlação com as respectivas energias envolvidas em sistemas moleculares. Uma sucinta síntese desse aspecto, dentro das publicações selecionadas, foi realizada, pois o conceito de distância intermolecular é fundamental para a plena compreensão das interações intermoleculares.

Com o intuito de relembrar a correlação da energia potencial com a distância, visto que essa dependência será discutida, a equação abaixo mostra a proporcionalidade da energia de interação e a distância intermolecular.

$$E_{int} \propto \frac{1}{r^n}$$

As modificações do expoente  $n$  determinam a dependência da energia de interação com a distância intermolecular, relação da energia é então, inversamente proporcional à distância intermolecular.

Murthy (2006) relata que a dependência da distância para interações íon-dipolo é da proporção de  $r^{-2}$  e nas interações íon-dipolo induzido é de  $r^{-4}$ . A dependência da energia com a distância de interação para dipolo-dipolo é de  $r^{-3}$ , para dipolo-dipolo induzido e dipolo induzido-dipolo induzido é de  $r^{-6}$ .

Como em muitos materiais didáticos essa correlação da energia das interações com a distância não é discutida e o significado de tais expoentes pode inclusive, colaborar com a compreensão das interações. Nesse contexto, da separação intermolecular, é dado destaque a algumas das publicações selecionadas, entre elas, um artigo que discute a questão da distância intermolecular e a dependência da energia de interação para as forças dispersivas.

Farina *et al.* (2013) descreve que experimentos com coloides, realizados em 1940, por Verwey e Overbeek, discordavam da previsão de London em relação à correlação das forças dispersivas e as distâncias.

Os experimentos apresentaram que as interações dispersivas entre dois átomos, diminuem para longas distâncias, mais rapidamente que  $1/r^6$ . Além disso, Overbeek especulou que tal mudança na lei de força, era devido a efeitos de retardamento da interação eletromagnética. A influência desses efeitos de retardamento sobre as forças de London-van der Waals, foi primeiramente reportada

por Casimir e Polder, no final de 1940. Após cálculos perturbativos de quarta ordem, concluíram que  $U(r) \propto r^{-7}$ .

Realmente, essa alteração no fator de dependência da distância intermolecular, para as interações dispersivas, não é abordada em livros de química sobre as interações intermoleculares, fato reconhecido por Holstein (2001), "*um pouco menos conhecido é o fato de que, em distâncias maiores, o caráter da interação muda e varia como  $1/R^7$* ".

O autor explica, que a origem dessa mudança é o retardamento, isto é, o tempo de propagação finito dos sinais que conectam os dois sistemas, mas a maneira precisa em que esta modificação acontece, não é tão fácil de calcular e geralmente não é apresentada (HOLSTEIN, 2001).

Cougo-Pinto, Farina e Tort (2000) também relatam, que no trabalho de Casimir e Polder, a energia de interação para duas partículas com polarizabilidades estáticas varia com  $r^{-7}$ .

Ainda que o objetivo seja apresentar os conceitos fundamentais para o entendimento das interações intermoleculares, existe a preocupação em expor aspectos observados na literatura selecionada. Assim como esse apontamento em relação à dependência da distância das forças dispersivas.

Após a elucidação do conceito de energia de interação e ideias-chave que fundamentam a compreensão desse tema, como as equações para os potenciais de interações atrativas e repulsivas. Alguns detalhes dos termos de contribuição energética e uso de ferramentas computacionais foram abordados, além de uma discussão da dependência da distância intermolecular.

A compreensão do potencial de Lennard-Jones, tanto a equação quanto o gráfico, reúnem a maior parte das informações importantes, no que se refere à energia de interação intermolecular. O potencial de Lennard-Jones concentra os principais conceitos vistos até aqui, as interações classificadas como atrativas e repulsivas podem ser diferenciadas, através dos sinais dos termos da equação e interpretação do gráfico, a distância em que forças atrativas e repulsivas são balanceadas e diversos outros detalhes.

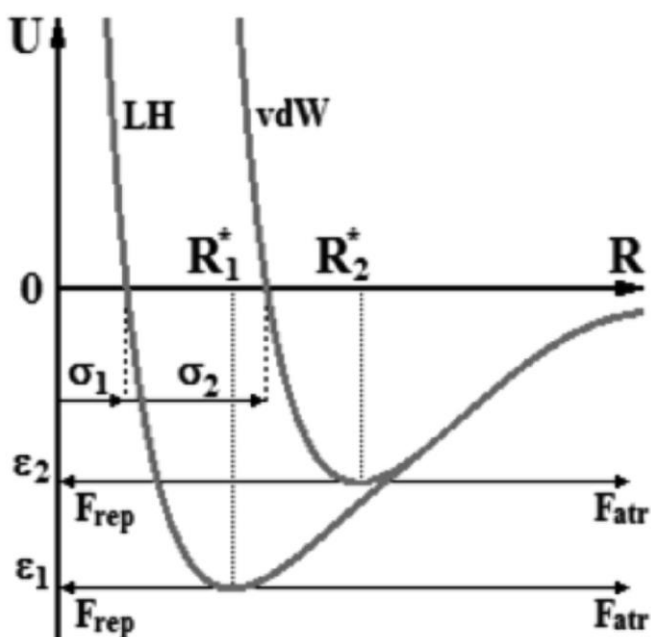
Nesse sentido, é possível observar a relevância do potencial de Lennard-Jones, apresentado em uma das figuras dos trabalhos selecionados, cujo enfoque está em demonstrar, a semelhança entre as curvas correspondentes às forças de van der Waals e ligações de hidrogênio, sobretudo as forças atrativas. E a considerável

diferença, entre a profundidade dos poços potenciais e das curvas que representam as forças repulsivas, tudo isso, em função da distância intermolecular. Além de exibir a capacidade do potencial de Lennard-Jones, em envolver inúmeros aspectos fundamentais à energia de interação intermolecular.

Para entender o contexto da Figura 13, dentre vários objetivos, o artigo discute a possibilidade de a ligação de hidrogênio ser considerada uma interação de van der Waals, com base na Teoria da Perturbação da Simetria Adaptada (SAPT). Oliveira e Araújo (2012) sugerem a reflexão, se, para um modelo clássico da ligação de hidrogênio ( $X - Y^{\delta} \cdots H^{\delta+} - Z$ ), seria possível a coexistência de uma interação do tipo van der Waals.

Essa discussão é pautada na análise de um gráfico de energia potencial em função da distância, com ligação de hidrogênio e interações de van der Waals representadas no mesmo gráfico. A estabilidade intermolecular, é resultado de uma análise coerente da interação dominante, oriunda da interpretação das energias de interações atrativas e repulsivas entre  $X - Y$  e  $H - Z$ , como é apresentado na (figura 15).

Figura 15 - Curvas de energia potencial para ligação de hidrogênio (LH) e interação de van der Waals (vdW).



Fonte: Oliveira e Araújo (2012), p. 2003.

Por meio do gráfico, observa-se que a força de atração intermolecular é única e sujeita a uma maior estabilidade. Para a força repulsiva, há diferenças tanto em função das distâncias interatômicas ( $\sigma_1 < \sigma_2$ ), quanto em relação ao mínimo de energia ( $\epsilon_1 < \epsilon_2$ ). O termo repulsivo apresenta um valor de expoente  $n$  igual a 12, para as interações de van der Waals, enquanto nas ligações de hidrogênio, o valor de  $n$  varia entre 8 e 10. Isso também demonstra porque que as energias das ligações de hidrogênio são mais elevadas em relação às interações de van der Waals (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

O fato do comportamento do potencial de Lennard-Jones, dos diferentes tipos de interações, não exibirem largas diferenças, principalmente, para as interações atrativas, ressalta a importância de uma visão mais unificada das interações intermoleculares e que as principais distinções entre elas, estão vinculadas à energia envolvida, à natureza das interações e a dependência dessa energia de interação em função das distâncias intermoleculares.

Outro trabalho selecionado, que defende as interações intermoleculares com um potencial único, apresenta uma abordagem em que até mesmo as ligações químicas, para os autores, não mostram fundamentais diferenças entre si e entre as interações intermoleculares.

Rivera-Rivera *et al.* (2017), tiveram como objetivo de trabalho, oferecer uma perspectiva que sustente a afirmação, de que não há diferença fundamental entre ligações covalentes, ligações iônicas, ligações de hidrogênio, ligações com halogênios e as interações de *van der Waals*.

Essa unificação das ligações químicas e interações é construída a partir de uma transformação canônica, mais bem descrita pelos autores.

O termo *forma canônica* para uma classe de potenciais moleculares refere-se a uma função adimensional obtida de cada potencial molecular dentro da classe definida por um afim prontamente reversível. Além disso, para ser considerado canônico, as formas adimensionais obtidas de todos os potenciais moleculares dentro da classe definida pela transformação canônica devem concordar dentro de uma ordem especificada de alta precisão. A característica saliente dessas formas canônicas é que elas codificam a "forma" de suas curvas de potencial molecular associadas.

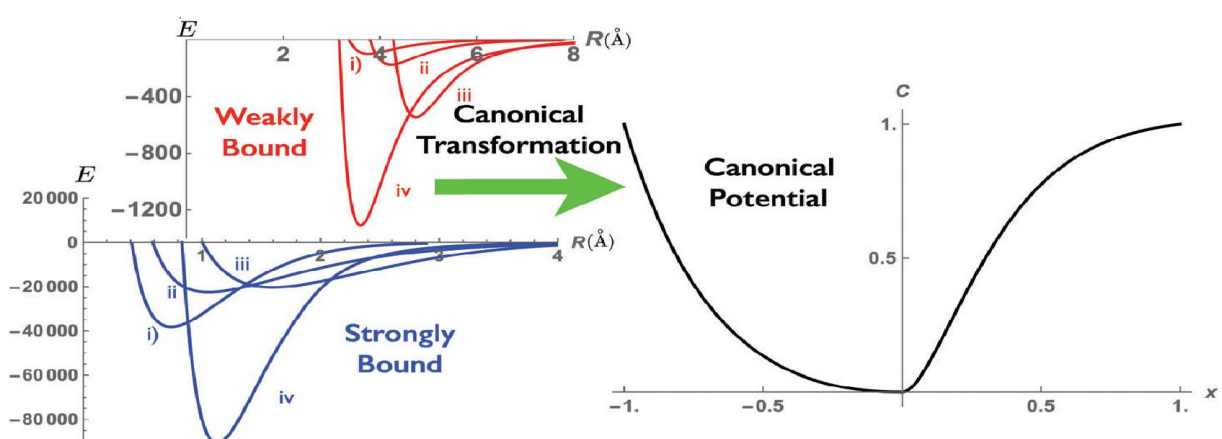
A definição acima da forma canônica implica que, as curvas de potencial para todas as moléculas na classe considerada, que compartilham uma forma canônica comum, têm a mesma forma. A origem dessas transformações canônicas está enraizada no teorema de Hellmann-Feynman e, portanto, na mecânica quântica molecular fundamental (RIVERA-RIVERA *et al.*, 2017).

Segundo os autores, em oposição aos conceitos tradicionais sobre ligações químicas, esse tipo de abordagem canônica apresenta uma forma unificada em relação à natureza da interação entre pares. Tal modelo corrobora com a concepção de que não há distinção entre interações intermoleculares, ligações de hidrogênio, ligações halogênio, interações de *van der Waals* e as ligações químicas (iônica, covalente e metálica).

A (figura 16) apresentada por Rivera-Rivera *et al.* (2017), mostra à esquerda, um gráfico das curvas de energia potencial dimensional, de moléculas fracamente ligadas (vermelho; (i) Ar<sub>2</sub> (ii) Ar-HBr (iii) OC-Cl<sub>2</sub> (iv) OC-HF) e moléculas fortemente ligadas (azul; (i) H<sub>2</sub> (ii) H<sub>2</sub><sup>+</sup> (iii) LiH (iv) CO).

De acordo com os autores, as moléculas foram intencionalmente escolhidas para fornecer respectivamente exemplos de: (i) uma molécula de van der Waals; (ii) uma molécula fraca ligada a hidrogênio; (iii) uma molécula ligada a halogênio; (iv) uma ligação de hidrogênio mais forte que em (ii); (v) a ligação covalente clássica de dois elétrons; (vi) a ligação clássica de um elétron; (vii) uma ligação iônica e; (viii) uma ligação covalente múltipla.

Figura 16 - Fracamente ligado (vermelho) e fortemente ligado (azul); curvas de energia potencial de interações interatômicas emparelhadas ( $E(R)$  em  $\text{cm}^{-1}$ ) transformadas em uma curva potencial canônica. No lado atrativo, o potencial canônico é avaliado em  $x$ ,  $0 \leq x \leq 1$ , enquanto no lado repulsivo o potencial canônico é avaliado em  $-x$ ,  $-1 \leq x \leq 0$ .



Fonte: Rivera-Rivera *et al.* (2017), p. 15867.

As diferentes características dessas curvas de energia potencial dimensional (azul e vermelho), refletem os diferentes tipos e classes de ligações interatômicas representadas. Todavia, a aplicação da transformação canônica, em forma

adimensional às seções das curvas de potencial, para cada uma das moléculas, revela que, essas curvas de energia potencial dimensional têm a mesma forma da curva adimensional.

O fato de que cada uma das curvas de energia potencial na (figura 18), pode ser transformada na mesma curva canônica adimensional por meio de uma transformação, sugere que as características de ligação intrínseca inerentes às ligações covalentes, ligações iônicas e interações intermoleculares, produzem distribuições de força associadas, que compartilham uma forma adimensional comum (RIVERA-RIVERA *et al.*, 2017).

Analisando de maneira diferente, a tentativa de unificar os diferentes tipos de interações intermoleculares, numa única representação gráfica, mesmo que de forma adimensional, confirma a importância do potencial de Lennard-Jones na interpretação das interações. Tal potencial, é um dos melhores modelos matemáticos para descrever as interações intermoleculares com ênfase no caráter energético.

Também é importante observar que o potencial de Lennard-Jones, agrega muitas das informações relacionadas à energia de interação, portanto, foi escolhido como o último tema a ser abordado no contexto das contribuições energéticas de cada tipo de interação. Compreendem as interações atrativas e repulsivas, a energia envolvida em tais interações, a correlação entre a distância intermolecular e a energia de interação, além de ser também uma forma de unificar as interações intermoleculares.

Em síntese, a intensidade das interações intermoleculares está intrinsecamente relacionada à natureza das interações intermoleculares. E como diversos complexos intermoleculares podem ser estabilizados pelos distintos tipos de interações, desde as forças dispersivas até as interações de transferência de carga do tipo doador-receptor, se faz importante a compreensão das contribuições de cada tipo de interação, permitindo o ajuste da magnitude das interações intermoleculares para projetar nos materiais os efeitos desejáveis (DOUGLAS; KOLLMAN, 1980).

Em função da imensa importância das interações intermoleculares, consideravelmente se busca o progresso de abordagens teóricas, para descrever as interações intermoleculares e uma das técnicas mais poderosas entre os métodos modernos, para investigar a natureza das interações, é a decomposição da energia de interação molecular total (DOUGLAS; KOLLMAN, 1980).

Reunindo o que foi identificado nas publicações, é possível inferir os conceitos fundamentais para a compreensão da energia de interação intermolecular. Indubitavelmente, a equação para cálculo do potencial de interação total sustenta os demais parâmetros que constituem a estrutura deste tema.

Um dos conceitos representado nessas equações são as interações atrativas, denominadas de longo alcance por serem dominantes em distâncias intermoleculares maiores. Estas interações são constituídas pelas forças dipolo-dipolo (orientação), dipolo-dipolo induzido (indução) e dipolo induzido-dipolo induzido (dispersão).

Todos esses tipos de interações atrativas apresentam diferentes contribuições energéticas e são dependentes da natureza elétrica das moléculas, além das distâncias intermoleculares. Nesse contexto, as interações dispersivas demandam de atenção especial por serem inteiramente compreendidas, com base na química quântica e os conceitos de momento de dipolo, polarizabilidade e potencial de ionização, são parâmetros que circundam a estrutura conceitual de todas essas interações de atração.

Outros conceitos que emanam, agora das interações repulsivas, denominadas de curto alcance, por apresentarem uma maior dependência da separação intermolecular, a sobreposição das nuvens eletrônicas é o principal.

Assim que a aproximação entre as moléculas se torna menor e há predominância das interações repulsivas, a explicação é comumente pautada na sobreposição das nuvens eletrônicas e consequente repulsão entre os núcleos até o impedimento energético devido ao limite de ocupação dos orbitais.

Antes de uma conclusão sobre os conceitos fundamentais, é importante evidenciar que na abordagem da energia de interação é quase impossível, no contexto dessa análise de pesquisa bibliográfica, não destacar o uso de modelos e ferramentas computacionais para quantificar a contribuição de energia de cada interação molecular.

Métodos de análise de decomposição da energia de interação tem ganhado destaque na quantificação das energias de interação, através da química computacional, baseados em cálculos quânticos. Dentre os principais conceitos envolvidos estão as diferentes contribuições, que são representadas por: energia eletrostática de natureza atrativa ou repulsiva, energia da repulsão entre os spins orbitais na região *overlap*, energia de distorção dipolo-dipolo induzido da distribuição



eletrônica, energia derivada da transferência de carga entre os orbitais de fronteira e a energia proveniente das forças de dispersão de London.

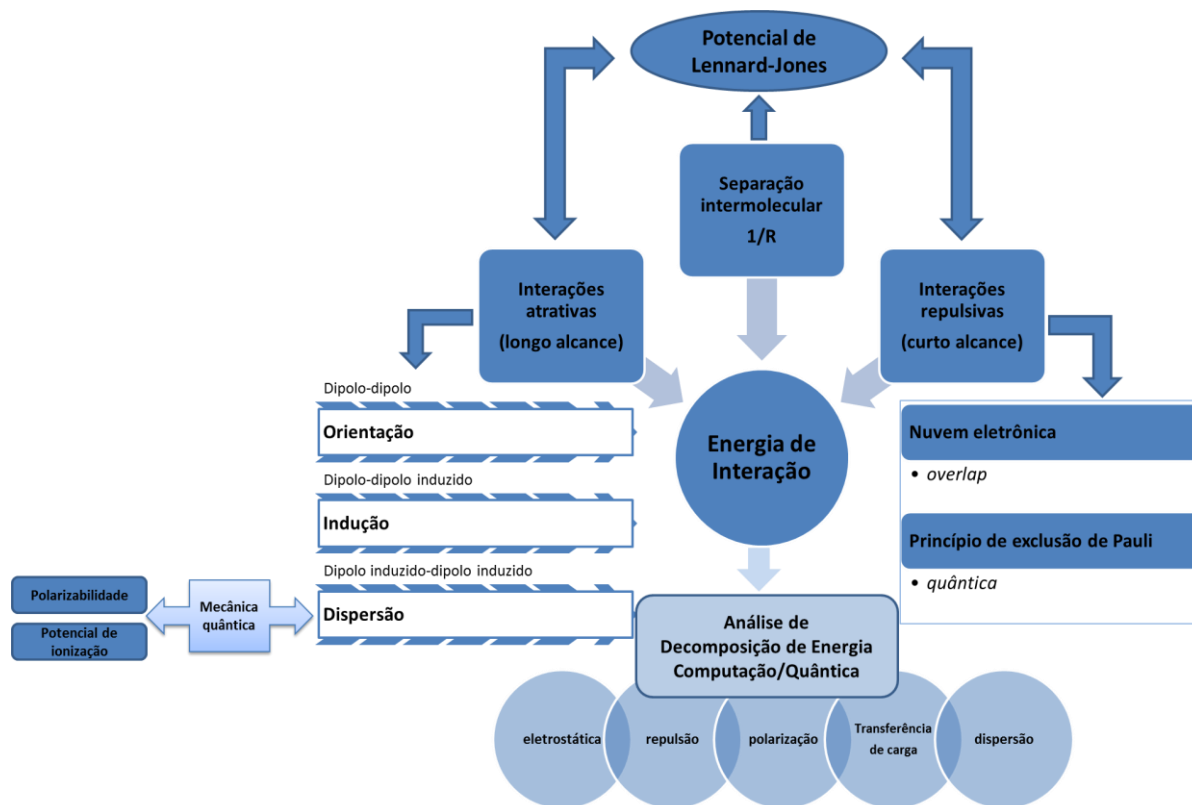
Outros dois conceitos fundamentais investigados nos artigos selecionados, são as distâncias intermoleculares, potencial de interação e a relação de dependência entre tais parâmetros, que é alterada devido à mudança do expoente  $n$  em  $1/r^n$  em função da natureza da interação. Além do potencial de Lennard-Jones que engloba a maior parte dos conceitos tratados nesse tópico referente à energia de interação.

Concluindo este tópico sobre a energia de interação, as equações de potências são fundamentais por demonstrar que vários tipos de interação contribuem energeticamente em um sistema molecular, sobretudo, a distinção entre as forças atrativas e repulsivas. Entre as atrativas se faz importante o entendimento de que os parâmetros polarizabilidade, momento de dipolo e potencial de ionização são correlacionados com tais interações com suporte da química quântica.

Conceitos básicos de quântica também são necessários para explicar a origem das forças repulsivas, que demanda da compreensão de nuvem eletrônica, sobreposição destas nuvens e o princípio de exclusão de Pauli.

A ideia-chave que encaminha para o pleno entendimento da energia de interação é a interpretação da dependência da distância em cada tipo de interação e o potencial de Lennard-Jones, que compreende praticamente todos os conceitos conectados a energia de interação. A (figura 17) representa o esquema que resume os conceitos fundamentais e parâmetros relacionados à energia de interação.

Figura 17 - Conceitos fundamentais sobre energia de interação com base na pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

Mesmo após uma síntese dos conteúdos que emergiram da análise dos artigos referentes ao princípio da energia de interação, o mapa conceitual que irá mostrar a rede de conceitos e inter-relações estabelecidas com base em tal análise, se faz importante a compreensão do esquema acima (figura 19) que exhibe os conceitos fundamentais que sugerem a estrutura do mapa a ser construído.

Nesse sentido, quando se pensa em dados/fatos que emergiram dos artigos selecionados sobre energia de interação molecular, houve tendências de determinadas propriedades físico-químicas de grupos químicos específicos como hidretos correlacionadas com parâmetros moleculares ou a própria energia de interação. Algumas discussões sobre as contribuições de cada tipo de interação em dímeros de moléculas conhecidas, por exemplo, a contribuição de interações de transferência de carga em dímeros de água, além de pares de moléculas utilizados como representantes dos diferentes tipos de interações com suas respectivas curvas potenciais.

Os conceitos apresentados no mapa conceitual, podem ser divididos desde a relação que mostra como a energia de interação é comumente exibida em materiais didáticos, através de tabelas com a magnitude de cada tipo de interação, as equações que podem ser das mais clássicas que relacionam parâmetros em função das separações intermoleculares e as que são fundamentadas em métodos quântico-computacionais, a importância de tais parâmetros moleculares, até o potencial de Lennard-Jones como modelo capaz de abranger muitos dos conceitos fundamentais ao entendimento da energia de interação.

E por fim, os princípios que para os artigos analisados, foram representados no mapa por três conceitos que devem estar presentes e perpassam outros conteúdos do conhecimento químico, as interações intermoleculares vistas unificadamente, evidenciando o reconhecimento da existência de diferentes tipos de interações que podem atuar em um mesmo sistema molecular. A compreensão de que a principal diferença entre as ligações químicas e as interações intermoleculares, está relacionado a energia dispensada em cada sistema e por último, o caráter dominante da contribuição das interações dispersivas, para a energia de interação intermolecular total, na maior parte dos sistemas moleculares.

Vale ressaltar, cada uma das publicações selecionadas é mais abrangente e aborda diferentes conhecimentos, mas o foco aqui, foi explorar os conteúdos conceituais sobre a energia de interação molecular, caracterizada como uma ideia-chave dentro tema interações intermoleculares.

Em seguida, um mapa conceitual (Apêndice E) foi organizado com o propósito de evidenciar a rede de conceitos, que representa o conhecimento químico sobre energia de interação, através da análise dos artigos selecionados, principalmente destacando as relações entre esses conceitos. Alguns exemplos sobre dados/fatos, conceitos e princípios que constam no mapa conceitual foram mais detalhados abaixo.

No contexto do artigo de Glazier, Marano e Eisen (2010), em que há um estudo sobre as tendências de pontos de ebulição de hidretos, uma das passagens é caracterizada como “fatos” e está relacionada com a afirmação de que “*geralmente se assume que alto ponto de ebulição é resultado de forte atrações intermoleculares*”, apesar da correta correlação entre a intensidade das interações com a propriedade física ponto de ebulição, as explicações para tendência de pontos de ebulição, há uma demanda por explicações mais detalhadas para tal afirmação.

Do artigo de Murthy (2006), que discute o reconhecimento das interações intermoleculares, um conceito extraído que está relacionado com o apontamento de que *“a energia de interação depende da natureza das espécies envolvidas, sua orientação relativa e sua separação”*, caracterizado na análise fundamentada nos conteúdos conceituais, como “conceito” por apresentar a importância existente na relação da energia de interação com parâmetros moleculares e as distâncias intermoleculares.

Um trecho classificado a partir da análise como um “princípio” em Rivera-Rivera *et al.* (2017), em especial pela característica de perpassar por todo o conhecimento químico relacionado ao tema está resumido no trecho em que *“não existe uma distinção muito fundamental entre interações de van der Waals, ligações covalentes e ligações de hidrogênio”*, essa perspectiva é fundamental por não visualizar as interações intermoleculares de forma fragmentada e extremamente distinta das ligações químicas.

O mapa é uma tentativa de sintetizar os principais dados/fatos, conceitos e princípios presentes nos artigos, que de alguma forma abordaram a energia de interação e mostrar quais as inter-relações entre estes conteúdos conceituais, reafirmando a importância do tema no contexto das interações intermoleculares.

### **6.1.2 Interações dispersivas**

Outro conceito a ser abordado como uma ideia-chave sobre o tema, são as forças dispersivas, que demonstram a sua importância no contexto das interações intermoleculares, dado o número de trabalhos que abordam em diferentes aspectos desse conceito.

Algumas publicações apontam características históricas, no sentido de expor a origem e natureza das forças dispersivas, além de trabalhos que buscam formas de melhorar a compreensão dessas interações, principalmente relacionados a equívocos comumente mencionados, como o não reconhecimento da universalidade das forças dispersivas e seu caráter aditivo.

Universalidade caracterizada pela presença das interações dispersivas em quaisquer tipos de sistemas moleculares, independente da polaridade das moléculas

que constituem tais sistemas. E aditividade dessas interações, que está relacionada a capacidade de se somar às forças das demais interações, possivelmente presentes.

Uma suposta gênese desses erros cometidos pelos estudantes, dentre os inúmeros problemas que acometem o processo de ensino de química, pode ser a ausência dessas temáticas no ensino médio e graduação, evidenciada pelos livros didáticos que norteiam o tratamento dos conteúdos pelos professores em sala de aula (PAPPA; TSAPARLIS, 2011).

Em cursos introdutórios de graduação em química, são poucos os relatos de abordagem para ênfase dessas questões, aditividade e universalidade das forças dispersivas, características importantes pouco discutidas de tais forças. O desenvolvimento da compreensão conceitual e de modelos mentais, de como surgem as interações de dispersão e sua importância em resultados macroscópicos, são fundamentais e necessários (GOTTSCALK; VENKATARAMAN, 2014).

As forças dispersivas como outros conceitos fundamentais no ensino das interações intermoleculares e da química de uma maneira geral, apresentam diferentes nomenclaturas para um mesmo conceito, embora com significados equivalentes, esses aspectos podem gerar equívocos. As forças dispersivas podem ser denominadas de: forças de dispersão, forças de London, forças de dispersão de London, forças de van der Waals-London, interações dipolo induzido-dipolo induzido e interações dipolo induzido-dipolo instantâneo.

Comum também no ensino das interações intermoleculares é o fato de, ao retratar um conceito fundamental, faz-se necessário o entendimento de vários parâmetros moleculares e propriedades específicas. É possível listar alguns relevantes para a compreensão das forças dispersivas: polaridade, nuvem eletrônica, polarizabilidade, geometria molecular, simetria de cargas, sobreposição, momento de dipolo, indução, carga elétrica e energia de interação.

Uma das formas pragmáticas de começar a explicar as ideias essenciais sobre esse tipo de interação é apresentando a definição segundo a IUPAC (2014):

Forças de London são forças atrativas entre moléculas apolares, devido à sua polarizabilidade mútua. Elas também são componentes das forças entre as moléculas polares. Também chamadas de 'forças de dispersão'.

A definição da IUPAC deixa evidente a percepção de relevância do parâmetro molecular denominado polarizabilidade, termo que carrega em seu significado, outros conceitos como nuvem eletrônica e campo elétrico. E na segunda frase da definição fica subentendido a natureza universal das forças dispersivas.

É interessante notar, do ponto de vista conceitual, que dentre os equívocos mais comuns supracitados, presentes em trabalhos que tratam do ensino das interações intermoleculares, sobretudo das forças dispersivas, são assuntos explorados prontamente em um trecho destacado do capítulo extraído do livro *Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente*, muito utilizado na graduação em química, segue a definição de Atkins e Jones (2006):

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 da molécula. **Elas se superpõem às interações dipolo-dipolo**. Moléculas polares também atraem moléculas não-polares através de interações fracas dipolo-dipolo induzido.

As definições apresentadas são importantes à medida que se verifica que a universalidade das forças dispersivas e sua aditividade, mesmo que constem nos livros-texto, devem ser mais bem elucidadas no estudo do tema.

Dentre os trabalhos analisados, muitos mencionam o caráter universal das forças dispersivas. Eles destacam que elas estão presentes em todos os tipos de átomos e moléculas, mesmo as moléculas polares, apontam uma parcela de contribuição desse tipo de interação. Em suma, descrevem as forças de dispersão de London como aditivas e universais (FOWKES, 1963; BUCKINGHAM; FOWLER; HUTSON, 1988; GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010; ZHU; CUI; WANG, 2010; OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Jasien (2008) ao defender o uso da área superficial no ensino das interações intermoleculares, considera que a analogia com o Velcro pode ajudar a descrever a natureza aditiva das interações dispersivas. Embora não seja ideal, pode transmitir a noção de que cada interação, quando encontrada em grande número, pode resultar em uma forte adesão.

Segundo os textos analisados, percebeu-se uma combinação em manifestar onde atuam tais interações e como se processam a nível molecular. Assim, as forças dispersivas ou forças de dispersão de London são dominantes entre as moléculas apolares, ou átomos de gases inertes. Esse tipo de interação se inicia com as

flutuações das cargas (elétrons), e consequentes interações eletrostáticas, há uma distorção da nuvem eletrônica (distribuição espacial de cargas), dando origem a um momento de dipolo instantâneo que induz a formação de um dipolo na molécula adjacente (FOWKES, 1963; BUCKINGHAM; FOWLER; HUTSON, 1988; MURTHY, 2006; GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Alguns trabalhos procuram deixar evidente, que existe uma relação intrínseca entre as forças dispersivas e a polarizabilidade, tal como a própria definição da IUPAC destaca.

De acordo com Glazier, Marano e Eisen (2010), a deformação da nuvem eletrônica, tem por característica separar centros de cargas positivo e negativo, e a facilidade com que ocorre essa deformação, é conhecida como polarizabilidade.

Outra definição interessante, agora dada por Gottschalk e Venkataraman (2014), os autores descrevem as forças dispersivas, como uma consequência da dinâmica da nuvem eletrônica, visto que o comportamento aleatório da nuvem, pode provocar uma distorção momentânea da distribuição simétrica dos elétrons.

Mesmo não apresentando uma definição, Struyf (2011) classifica a polarizabilidade como um dos parâmetros fundamentais para o entendimento das forças dispersivas. Por consequência, é significativamente relevante, abordar as considerações dos trabalhos selecionados sobre tal conceito, visto que o parâmetro é determinante para as interações dispersivas.

Diversos trabalhos relacionam a influência da polarizabilidade em propriedades físicas, e como justificativa para tal conexão, na maior parte dos casos, as forças dispersivas aumentam com a polarizabilidade.

Em alguns dos trabalhos analisados, defende-se abertamente a utilização da polarizabilidade como representação direta das forças dispersivas. De acordo com Jasien (2008) alguns artigos discutem sobre qual seria a grandeza mais apropriada para caracterizar esse tipo de interação. O autor relata que em livros mais antigos, em especial os de química geral, as forças dispersivas em compostos orgânicos apolares, são relacionadas com as suas respectivas massas molares. Em livros mais contemporâneos, a massa molar é substituída adequadamente pela polarizabilidade.

Outras publicações procuram correlacionar a polarizabilidade a diferentes parâmetros, algumas, no sentido de apontar um novo aspecto químico a ser explorado e outras com o propósito de facilitar a compreensão do fenômeno.

Jasien (2008) considera que a polarizabilidade além de ser um conceito novo, se caracteriza como potencialmente difícil para os estudantes, ainda que seja a mais apropriada para discutir a origem física do efeito dispersivo. Uma alternativa sugerida pelo autor, por ser mais acessível, seria a área superficial molecular.

Por exemplo, como um estudante saberá como as polarizabilidades elétricas de dois compostos se comparam? Uma quantidade mais facilmente compreensível, ainda que menos fisicamente correta, é a área superficial molecular.

Um argumento utilizado pelo autor, que corrobora com o uso da área superficial como “substituto” da polarizabilidade para efeitos dispersivos, é o de o conceito geométrico ser mais compreensível aos alunos. O conceito de área superficial, por exemplo, pode ser um facilitador na explicação dos diferentes pontos de ebulição para isômeros de cadeia de um composto orgânico.

A área superficial do pentano permite maiores pontos de contato para atrações intermoleculares, enquanto o 2-metilbutano apresenta uma área mais compacta e esférica, com menos interações dispersivas, por consequência, ponto de ebulição mais baixo (CAREY, 2011, p. 109).

Utilizando dados da literatura e programas computacionais, Jasien (2008) exhibe a Tabela 5 com dados da área superficial de álcoois e hidrocarbonetos, e sua correlação com os pontos de ebulição.

Tabela 5 - Comparação de áreas superficiais com pontos de ebulição para alguns álcoois e alcanos.

Álcool	CPK Área/Å <sup>2</sup>	T <sub>eb</sub> /K	Hidrocarboneto de comparação	CPK Área/Å <sup>2</sup>	T <sub>eb</sub> /K
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	82.0	351.5	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	157.3	341.9
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	103.9	370.3	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	179.1	371.5
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	125.8	390.6	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	201.0	398.7
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	147.6	411	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	222.9	423.8
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> OH	169.5	430	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	246	447.2
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> OH	191.4	448	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	267.88	468
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> OH	213.3	468	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	289.75	489
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> OH	235.1	485	-	-	-

Fonte: Jasien (2008), p.1224.



A tabela retrata o aumento dos pontos de ebulição de ambos os compostos, álcoois e hidrocarbonetos, com o respectivo aumento das áreas superficiais. Nota-se que para muitos casos o uso da área superficial pode contribuir na explicação de tendências de propriedades físicas.

No artigo de Struyf (2011) há uma proposta de abordagem analítica para relacionar as forças intermoleculares com os pontos de ebulição de compostos orgânicos monofuncionais. O parâmetro utilizado pelo autor, como uma aproximação quantitativa da polarizabilidade, que determina as forças dispersivas, foi a refratividade molar.

A refratividade molar ( $R_M$ ) foi escolhida para quantificar as interações dispersivas, apesar de não conseguir distinguir interações entre as cadeias alquílicas e entre a cadeia alquílica e os grupos funcionais, pois se faz necessário a utilização do parâmetro momento de dipolo. Pela fórmula pode-se notar que a refratividade molar é extremamente dependente do volume molar aparente, assim como a polarizabilidade.

$$R_M = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \frac{M}{\rho}$$

A refratividade é então relacionada ao volume molar e refração da luz, representada pelo índice de refração ( $n$ ). O volume molar aparente é relação entre a massa molar ( $M$ ) e a densidade ( $\rho$ ).

O fato de se utilizar a refratividade molar, foi influenciado talvez pela facilidade de se encontrar tais parâmetros na literatura, inseridos na equação para uma variedade de moléculas orgânicas: massa molar, densidade e índice de refração.

O trabalho de Struyf (2011) propõe uma equação matemática, para mostrar a relação das interações com o que o autor chama de ponto de ebulição incremental ( $BP_{incr}$ ), que seria a diferença entre os pontos de ebulição de um composto orgânico monofuncional ( $BP_{Rfg(R')}$ ) e seu respectivo hidrocarboneto ( $BP_{R(H \text{ ou } R')}$ ), por exemplo, ácido propanoico e propano.

$$BP_{Rfg(R')} = BP_{R(H \text{ ou } R')} + BP_{incr}$$

Como a diferença corresponde diretamente ao grupo funcional, quando não há ligações de hidrogênio, a equação usa o momento de dipolo ( $\mu$ ) e a refratividade molar ( $R_M$ ) para calcular esse ponto de ebulição incremental, somando as contribuições das forças dipolo-dipolo e forças dispersivas, respectivamente.

Considerando os grupos funcionais sem ligação de hidrogênio, esses  $BP_{incr}$  estão relacionados aos seus respectivos momentos dipolares ( $\mu$ ) e incrementos de refratividade molar ( $R_{Mincr}$ ) pela seguinte equação:

$$BP_{incr} = a\mu + bR_{Mincr}$$

Os coeficientes a e b são calculados por análise de regressão de mínimos quadrados linear. A partir dessa equação, as interações dispersivas específicas para os grupos funcionais podem ser quantificadas pela refratividade molar incremental ( $R_{Mincr}$ ) entre o composto monofuncional e o correspondente hidrocarboneto de referência. O cálculo do  $R_{Mincr}$  é análogo ao do  $BP_{incr}$ .

Ao comparar as diferenças dos pontos de ebulição, com os resultados dos cálculos das equações propostas, que utilizam os dados de momento de dipolo ( $\mu$ ) e refratividade molar ( $R_M$ ), Struyf (2011) conclui, que há uma ótima correlação e, confirmação de que tais parâmetros, são ótimos para investigar as interações intermoleculares.

Outro trabalho selecionado nessa categoria, comprova essa correlação entre a polarizabilidade ( $\alpha$ ) e a refratividade molar ( $R_M$ ) através dos valores dispostos em uma tabela para quatro grupos de hidretos, como pode ser observado na (tabela 6).

Tabela 6 - Refratividade molar e polarizabilidade de hidretos do grupo 5A.

Hidretos	$R_M/mL$	$\alpha/(\text{Å}^3)$
NH <sub>3</sub>	5,49	2,2
PH <sub>3</sub>	11,7	4,6
AsH <sub>3</sub>	13,4	5,3
SbH <sub>3</sub>	17,6	7,0

Fonte: Glazier, Marano e Eisen (2010), p. 1338.

Apenas os dados dos hidretos do grupo 15 da tabela periódica foram apresentados e a equação aplicada para os cálculos também enfatiza a relação entre os parâmetros:

$$R_M = \frac{4\pi N_A \alpha}{3}$$

Onde  $N_A$  representa o número de Avogadro. É importante ressaltar que alguns dos valores de  $R_M$  foram obtidos da literatura.

Um aspecto que pode ser explorado, é a introdução do conceito de polarizabilidade, por meio da compreensão da forma como pode ser calculado esse parâmetro a partir da refratividade molar.

Continuando no raciocínio de apresentar trabalhos que visualizam as forças dispersivas como consequência da polarizabilidade e a tentativa de investigar o uso de outros parâmetros para representá-la, o próprio trabalho de Glazier; Marano e Eisen (2010) sugere um caminho.

Conforme as autoras, é possível considerar, mesmo que em uma perspectiva introdutória, que se utilize o número de elétrons por molécula, correlacionado a pontos de ebulição de hidretos, embora isto seja imperfeito do ponto de vista energético.

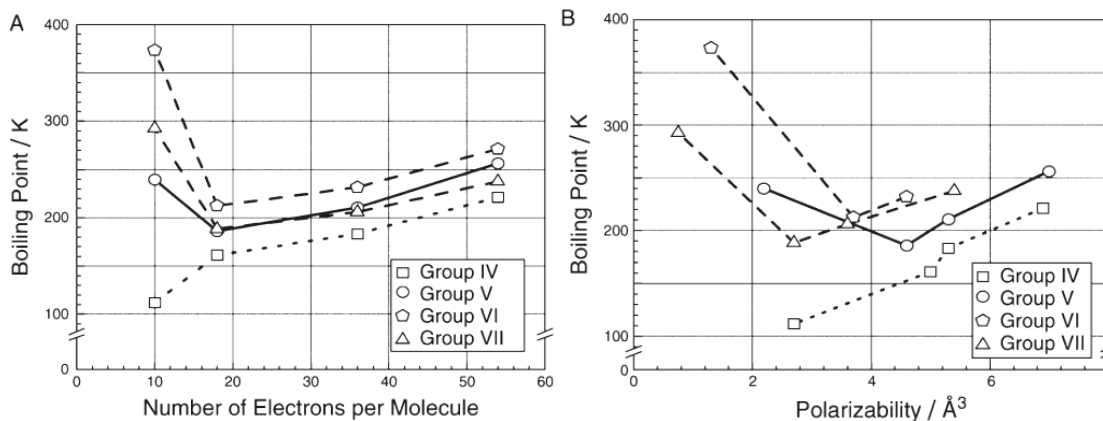
Dentre as razões citadas pelas autoras, está o fato das moléculas com maiores massas molares possuírem também maior número de elétrons, isso faz com que os gráficos de ponto de ebulição *versus* massa molar ou número de elétrons, apresentem aspectos semelhantes.

No entanto, as autoras defendem que ao invés da massa molar, o uso do número de elétrons se aproxima mais da base física das forças dispersivas. A ideia de mais um parâmetro, para possivelmente, substituir a polarizabilidade em gráficos que a correlacionam com propriedades físico-químicas, é destacada por Glazier; Marano e Eisen (2010):

Embora nenhuma simplificação do eixo x esteja perfeitamente correlacionada com a polarizabilidade, usar o número de elétrons é a melhor alternativa.

Efetivamente os gráficos presentes no artigo, que relacionam pontos de ebulição e número de elétrons (figura 18A), apresentam tendências semelhantes quando se substitui o número de elétrons pela polarizabilidade no eixo x (figura 20B), sendo que outras propriedades de hidretos também foram utilizadas no eixo y, como entalpia e entropia de vaporização.

Figura 18 - Pontos de ebulição de hidretos (IV-VII) em função do (A) número de elétrons por molécula e da (B) polarizabilidade.



Fonte: Glazier, Marano e Eisen (2010), p. 1337.

Em casos em que o número de elétrons dos hidretos, como  $\text{SbH}_3$  e  $\text{HI}$ , com 54 elétrons, os autores argumentam que as forças dispersivas dependem, além do número, a facilidade com que a nuvem de elétrons é distorcida, sendo necessário recorrer à polarizabilidade para explicar tal diferença e, concluir, que o composto  $\text{SbH}_3$  com maior polarizabilidade, tem o maior ponto de ebulição.

A partir do último gráfico apresentado na publicação entre polarizabilidade *versus* número de elétrons por moléculas Glazier; Marano e Eisen (2010), é possível confirmar que às duas variáveis são correlacionadas, mas a relação não é tão linear. Um detalhe evidenciado pelas autoras, é o de que, considerar o número de elétrons não leva em conta, como os elétrons são organizados ou quão firmemente eles são mantidos, ambos contribuindo para a polarizabilidade.

Até aqui apresentamos trabalhos que substituem a polarizabilidade por parâmetros, que os autores julgaram ser de mais fácil compreensão, como área superficial molecular, número de elétrons na molécula e refratividade molar. No entanto, podemos afirmar que a relação entre esses parâmetros aqui citados, com o volume molecular é que permite uma compreensão mais profunda e significativa da polarizabilidade. Assim, ao invés de substituir a polarizabilidade, nosso ponto de vista é que, esta importante propriedade molecular deve ser ensinada a partir de sua relação com tais parâmetros. Pode ser significativo aos alunos, que a polarizabilidade seja diretamente relacionada ao volume molecular, determinada por medidas de  $R_M$ , dado que esta propriedade depende do volume molar que, obviamente, está relacionado com o volume das moléculas individuais. Estas relações ainda

conseguem estabelecer uma conexão entre o aspecto macroscópico das substâncias ( $R_M$ ), com aspectos submicroscópicos, como volume molecular, nuvem eletrônica, área superficial e conseqüentemente polarizabilidade.

Levando em conta o conceito de polarizabilidade, Visser (2011) propõe a substituição dos termos  $a$  e  $b$  da equação de estado de van der Waals por esta constante. Verificando que tais constantes são linearmente proporcionais a polarizabilidade ( $\alpha$ ) das moléculas, o autor propõe uma nova equação de estado, contendo variáveis que podem ser medidas experimentalmente junto às constantes físicas.

De acordo com Visser (2011) foram pesquisados os dados de  $a$ ,  $b$  e  $\alpha$  da literatura, para 130 moléculas utilizadas no estudo, esse conjunto de moléculas inclui compostos apolares e polares. A correlação entre os coeficientes  $a$  e  $b$  e a polarizabilidade foi satisfatória e destaca que na série de alcanos lineares (ex. metano ao n-dodecano), o coeficiente de correlação chega a 0,99.

Esse artigo publicado no *The Journal of Physical Chemistry B*, mostra que a equação de estado de van der Waals pode ser reduzida a um parâmetro. A discussão do trabalho é baseada na demonstração das conversões de equações e correlações efetuadas. Essas correlações apresentam implicações em parâmetros termodinâmicos, incluindo parâmetros críticos, apesar disso, os mesmos puderam ser descritos em função de polarizabilidade, potencial de ionização e parâmetros físicos. A equação é apresentada abaixo derivada experimentalmente e baseada nas correlações encontradas:

$$p(V - 8\pi N_A \alpha) = RT e^{-\left(\frac{5\pi}{128}\right)\left(\frac{IN_A \alpha}{RTV}\right)} + \frac{5\pi^2}{16} \frac{IN_A^2 \alpha^2}{V^2}$$

onde  $N_A$  é o número de Avogadro,  $\alpha$  é a polarizabilidade,  $I$  é o potencial de ionização das moléculas e  $R$  é a constante universal dos gases ideais.

Como pode ser observado na equação, apenas constantes físicas e variáveis experimentalmente mensuráveis são utilizadas. A equação é testada em moléculas como dióxido de carbono e benzeno e de acordo com Visser (2011), “*A equação é provavelmente uma equação de estado mais realista para a descrição das interações dispersivas e repulsivas entre as moléculas*”.

É importante ressaltar que todas as modificações da equação de estado de van der Waals, foram baseadas nas correlações obtidas entre os parâmetros  $a$  e  $b$  e a polarizabilidade molecular. O que a priori, é a característica do trabalho que é

interessante à nossa investigação, sobretudo na análise da polarizabilidade como um conceito fundamental para as forças dispersivas, por conseguinte, para as interações intermoleculares. Uma discussão mais completa sobre este assunto é apresentada a seguir quando se discute a ideia-chave equação da van der Waals.

Em síntese, a partir dos trabalhos analisados pode-se elencar os conceitos fundamentais e ideias-chave que emergiram dessa parte da investigação. Inicialmente, a primeira ideia-chave relacionada as interações intermoleculares a ser abordada, foi a caracterização da energia de interação, em seguida, as forças dispersivas, sob o enfoque de definição de conceitos relacionados a tal interação.

Através do prisma conceitual, nas definições das forças dispersivas é notória a importância de conceitos como polarizabilidade e nuvem eletrônica. O primeiro é mais explorado nos trabalhos, principalmente pelo fato de determinar as interações dispersivas e o segundo é uma propriedade que parece ser considerada bem definida no conhecimento químico. E a partir da inferência das definições dessas interações, o caráter universal das forças dispersivas também é frisado como um conceito fundamental.

As propriedades utilizadas como formas de aproximação da polarizabilidade, com o objetivo de relacionar os mesmos com propriedades físico-químicas de compostos químicos e também de forma implícita otimizar a representação das forças dispersivas foram: área superficial, refratividade molar, número de elétrons e os coeficientes  $a$  e  $b$  da equação de van der Waals.

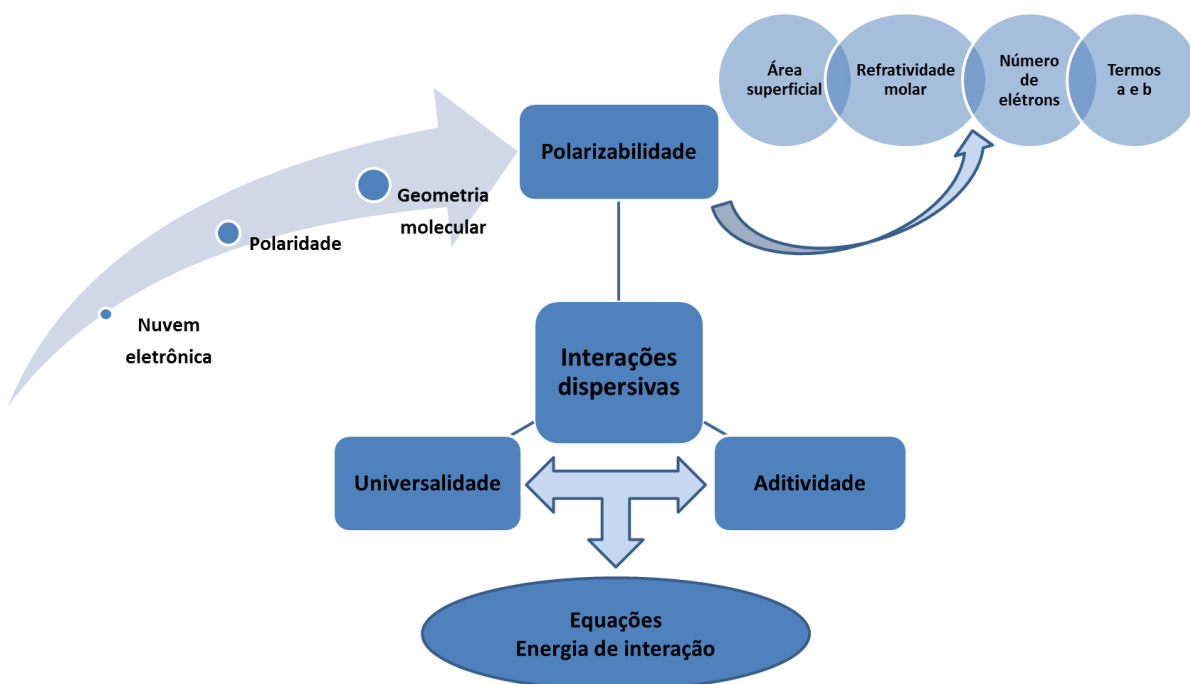
Em comum, as alternativas propostas por essas publicações usam como processo de validação, a correlação com propriedades físicas, comumente, os pontos de ebulição de diferentes moléculas.

Compilando o que foi encontrado nos trabalhos, é possível deduzir os conceitos fundamentais para a compreensão das forças dispersivas. Seguramente a tríade que sustenta esse tipo de interação é formado pelos conceitos de polarizabilidade, universalidade das forças dispersivas e a aditividade dessas interações. Obviamente que outros conceitos são derivados desses três ou necessários para o pleno entendimento deles.

A polarizabilidade exige como conhecimento prévio, o conceito de nuvem eletrônica, que por sua vez, requer a noção de conceitos básicos como polaridade e geometria molecular. O caráter universal e a aditividade das forças dispersivas demandam de ideias-chave sobre a energia de interação e suas respectivas

contribuições e a relação das forças dispersivas com propriedades físico-químicas, ideias que foram mais aprofundadas em outro momento do presente trabalho. A (figura 19) representa o esquema que resume os conceitos fundamentais, parâmetros e suas relações no que se refere as interações dispersivas.

Figura 19 - Conceitos fundamentais sobre as interações dispersivas com base na pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

Independente da síntese realizada, faz-se importante explicar o esquema acima, que é também um exercício para a elaboração do mapa conceitual fundamentado nos conteúdos conceituais que emergiram sobre as interações dispersivas.

Ficou evidente que quando se pensa nas forças de dispersão, alguns aspectos são fundamentais de serem considerados, o caráter universal que representa a existência de tais interações em todos os sistemas moleculares e a aditividade que está vinculada à contribuição dessas interações somadas às outras presentes.

A equação de energia de interação pode proporcionar a ênfase desses aspectos e destacar também o parâmetro molecular representativo das interações dispersivas, a polarizabilidade, que muitas vezes é considerada de difícil

compreensão. Logo, outros parâmetros são propostos para facilitar o entendimento das interações dispersivas como refratividade molar, área superficial, número de elétrons e o termo  $a$  e  $b$  da equação de van der Waals.

Por fim, a polarizabilidade a priori demanda de conceitos como nuvem eletrônica, polaridade e geometria molecular para sua plena compreensão com base nas publicações que foram investigadas. Considerando que as principais informações e ideias presentes nos trabalhos selecionados com enfoque nas forças dispersivas, um quadro resumo foi elaborado com os fatos ou dados, conceitos e princípios que emergiram um mapa conceitual desses artigos foi organizado (Apêndice E) com o propósito de evidenciar a rede de conceitos, que representa o conhecimento químico sobre as forças dispersivas através da análise dos artigos selecionados, principalmente destacando as relações entre esses conceitos.



### 6.1.3 Ligação de Hidrogênio

Uma das interações intermoleculares mais abordadas no ensino de química é a ligação de hidrogênio, devido a sua magnitude em relação às demais interações e importância na interpretação de inúmeras propriedades e fenômenos físico-químicos.

Essa interação pode ser vista sob diferentes aspectos em relação a sua natureza, desde a origem eletrostática até um possível caráter covalente que a ela apresenta. A partir das definições e recomendações dadas pela IUPAC, os conceitos fundamentais foram abordados também com base na literatura científica e inserções de uma ou outra informação pertinente.

As forças dispersivas, eletrostáticas de multipolos e de indução formam as principais fontes de interações atrativas entre as moléculas, mas outros tipos de forças atrativas são observados e são de grande importância. A mais difundida dessas interações é a ligação de hidrogênio, cuja ocorrência em líquidos simples como a água tem efeitos profundos nas propriedades físicas observadas.

Como em outros tópicos já tratados pelo presente trabalho, o elenco dos conceitos essenciais e ideias-chave relacionadas à ligação de hidrogênio se apresentam como principal propósito.

Mais uma vez por meio da seleção e elaboração das fichas de análise, de antemão foi possível elencar alguns conceitos inseridos no tema ligação de hidrogênio: eletronegatividade, doador-receptor, distância e ângulo da ligação, caráter covalente, 3-centros-4-elétrons, espectroscopia, magnitude, água, ligações de hidrogênio não clássicas, etc.

As definições encontradas no IUPAC *Compendium of Chemical Terminology*, (IUPAC GOLD BOOK, 2014), uma mais geral e a outra dentro do contexto da química orgânica teórica. A primeira definição de ligação hidrogênio é:

Uma forma de associação entre um átomo eletronegativo e um átomo de hidrogênio ligado a um segundo átomo relativamente eletronegativo. É melhor considerado como uma interação eletrostática, aumentada pelo tamanho pequeno do hidrogênio, que permite a proximidade dos dipolos ou cargas que interagem. Ambos os átomos eletronegativos são geralmente (mas não necessariamente) da primeira linha da Tabela Periódica, ou seja, N, O ou F. As ligações de hidrogênio podem ser intermoleculares ou intramoleculares. Com poucas exceções, geralmente envolvendo flúor, as energias associadas são menores que 20 - 25 kJmol<sup>-1</sup>.

Essa definição é a mais encontrada em livros didáticos, em que é dado destaque a natureza eletrostática da interação entre o átomo de hidrogênio e outro átomo com alta eletronegatividade, geralmente representados pelos átomos de nitrogênio (N), oxigênio (O) e flúor (F).

Segundo Reis (2008), é necessário maior criticidade no âmbito do ensino de química, sobretudo em relação às ligações de hidrogênio, segundo o autor, reflexões devem ser feitas sobre interpretá-las apenas como interações de átomos de hidrogênio com átomos fortemente eletronegativos.

A segunda definição dada pela IUPAC (2011) baseada na química orgânica teórica é:

Um tipo particular de multicentro (três centros - quatro elétrons)  $X - H \dots Y$  em que o átomo de hidrogênio central covalentemente ligado a um átomo eletronegativo X (C, N, O, S...) forma uma ligação fraca adicional com átomo Y (N, O, S...) na direção de seu orbital com par de elétrons solitário. A energia da ligação de hidrogênio, que é usualmente na faixa de  $12 - 65 \text{ kJmol}^{-1}$ , resultado da interação eletrostática e também da interação do orbital antiligante  $\sigma^*$  (XH)MO da molécula atuando como doador de hidrogênio e o par de elétrons isolado não-ligante  $MO_{NY}$  da molécula receptora de hidrogênio.

A definição apresenta valores de energia atribuídos à ligação de hidrogênio e evidencia que as contribuições para tal potencial de interação são oriundas das interações eletrostáticas e entre os orbitais do par doador-receptor de hidrogênio.

De acordo com Weinhold e Klein (2014), devido ao avanço da teoria quântica da ligação de hidrogênio, o caráter de covalência foi defendido em diferentes terminologias: "ressonância covalentônica" (Coulson, 1957), "orbitais moleculares de 3-centros" (Pimentel e McClellan, 1960), "transferência de carga" (Ratajczak, 1972) e "interações intermoleculares doador-receptor" (Weinhold e Landis, 2005).

Todas essas formulações fazem referência ao que é atualmente descrito como interação "3c/4e" (3-centros/4-elétrons) (Pimentel, 1951, Rundle, 1962, Coulson, 1964, Munzarova e Hoffmann, 2002, Weinhold e Landis, 2005), a simples extensão do conceito original de ligação de pares de elétrons 2c/2e de Lewis, subjacente a importantes fenômenos do tipo ressonância em ambos os domínios intra e intermolecular.

Quanto aos primeiros conceitos relativos às definições apresentadas, destaca-se a importância da eletronegatividade no entendimento da natureza eletrostática da ligação de hidrogênio e conhecimentos básicos de química quântica,

sobretudo a teoria do orbital molecular, que fundamenta a ideia de natureza covalente da interação, além da distância e energia da ligação, importantes na segunda definição.

A primeira discussão a ser aprofundada e que do ponto de vista educacional ainda não tão explorada nos materiais didáticos trata-se de uma abordagem que explore o quanto covalente é a ligação de hidrogênio. Entretanto, muitos trabalhos da área de ensino evidenciam o fato de as ligações de hidrogênio ainda serem tratadas como um caso especial de interações dipolo-dipolo (REIS, 2008; HERBST; FILHO, 2019).

Em geral, existem aproximações que consideram a interação intermolecular ligação de hidrogênio com um caráter covalente que pode atingir em torno de 10%, enquanto as interações restantes são consideradas como contribuições puramente eletrostáticas (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Weinhold e Klein (2014) apresentam algumas definições que enfatizam os conceitos que caracterizam a covalência das ligações de hidrogênio.

- (i)** uma ligação química fracionária devida à deslocalização por ressonância intermolecular entre  $A-H \cdots B \leftrightarrow A^- \cdots H-B^+$  (compartilhamento parcial, do tipo  $3c/4e$ , de um próton entre bases de Lewis), que surge geralmente da interação quanto-mecânica doador-receptor  $n_B \rightarrow \sigma^*_{AH}$ ;
- (ii)** uma atração do tipo ressonância associada ao compartilhamento de um próton (transferência parcial de próton) entre bases de Lewis competidoras  $A \cdots B$ ; com ordens de ligação fracionárias  $b_{AH}$ ,  $b_{BH}$  divididas entre padrões de ligação  $A-H \cdots B$  vs.  $A^- \cdots H-B^+$  da tríade  $A: \cdots H \cdots :B$ ;
- (iii)** a mais fraca de duas ligações doador-receptor competidoras ( $n_B \rightarrow \sigma^*_{AH}$  vs.  $n_A \rightarrow \sigma^*_{BH}$ ) numa tríade genérica  $A: \cdots H \cdots :B$ .
- (iv)** A minoria de um híbrido de ressonância geral  $A-H \cdots B \leftrightarrow A^- \cdots H-B^+$

Segundo os autores, tais definições ressaltam a tríade coletiva e os aspectos de ressonância competitivos do fenômeno ligação de hidrogênio, que podem ser usados para inserir conceitos mais gerais de ressonância  $3c/4e$  que exercem um papel fundamental na química estrutural.

Analisando as proposições numa perspectiva pedagógica, a interação por ligação de hidrogênio pode ser definida em termos de transferência de carga, doador-receptor e conceitos de ressonância entre ligações. O item (iii) é uma das definições que mais evidencia a consideração do caráter covalente da ligação de hidrogênio, a mais fraca entre duas ligações doador-receptor em competição.

A ideia da teoria clássica de valência onde o hidrogênio pode formar apenas uma ligação covalente ao preencher o seu orbital com um par de elétrons de spins opostos ou uma ligação iônica como íon  $H^+$  ou  $H^-$ . No entanto, essa percepção segundo Moore (1972), é equivocada, visto que a própria vida, como a conhecemos, depende da capacidade do átomo de hidrogênio de atuar como um elo entre dois outros átomos.

Nas definições fica evidente a importância dada à ressonância de Lewis, onde a posição dos elétrons pode ser modificada na ligação de hidrogênio. Lewis concluiu que a ligação de hidrogênio manifestava um aspecto "bivalente" do átomo de hidrogênio, que deveria ser considerado a extensão mais importante de sua teoria do par de elétrons da covalência química (WEINHOLD; KLEIN, 2014).

Considerando as alternativas teóricas para a definição da ligação de hidrogênio, a análise de decomposição da energia de ligação (interação) pode oferecer dados sobre a contribuição da transferência de carga que é um dos termos mais associados ao caráter covalente desse tipo de interação.

O trabalho de Kollman (1977), reportado na pesquisa bibliográfica, efetua uma análise geral das interações intermoleculares não covalentes, utilizando a análise de componentes de Morokuma e potenciais eletrostáticos para a energia de interação e estrutura de energia mínima para diferentes complexos. A (tabela 7) apresenta a série de complexos de hidrogênio formados por HF com diferentes moléculas e os termos que constituem a energia de interação total.

Tabela 7 - Componentes de energia para interações HF --- HX e X --- HF (kcal/mol).

HF ---- HX						
	HF	HOH	HNH <sub>2</sub>	HCl	HSH	HPH <sub>2</sub>
$\Delta E$	-7,82	-5,40	-3,53	-4,47	-2,35	-0,98
$\Delta E_{ES}$	-8,78	-5,49	-2,88	-6,44	-2,26	-0,53
$\Delta E_{POL}$	-0,52	-0,21	-0,08	-0,34	-0,17	-0,05
$\Delta E_{CT}$	-3,14	-2,52	-2,05	-2,82	-1,27	<b>-1,04</b>
$\Delta E_{EX}$	4,63	2,82	1,48	5,13	1,34	0,64
<b>R (Å)</b>	2,69	2,94	3,22	3,37	3,68	4,05
<b><math>\theta</math></b>	45	60	75	39	55	76
X ---- HF						
	HF	HOH	H <sub>3</sub> N	HCl	HSH	HPH <sub>2</sub>
$\Delta E$	-7,82	-13,22	-16,29	-3,44	-5,76	-6,90
$\Delta E_{ES}$	-8,78	-16,70	-24,97	-3,17	-5,70	-6,68
$\Delta E_{POL}$	-0,52	-1,31	-1,90	-0,16	-0,32	-0,56
$\Delta E_{CT}$	-3,14	-2,92	-4,58	-1,80	-2,66	-3,27
$\Delta E_{EX}$	4,63	7,71	15,17	1,69	2,92	3,61
<b>R (Å)</b>	2,69	2,69	2,69	3,40	3,40	3,40
<b><math>\theta</math></b>	45	0	0	71	68	0

Fonte: Kollman (1977), p. 4881.

A energia total de interação foi decomposta em eletrostática ( $\Delta E_{ES}$ ), que é a energia de interação entre as distribuições de carga das moléculas isoladas, polarização ( $\Delta E_{POL}$ ), que representa a energia de redistribuição de carga em fragmentos, transferência de carga ( $\Delta E_{CT}$ ), que representa a energia obtida por permitir a transferência de carga entre fragmentos e repulsão de troca ( $\Delta E_{EX}$ ) que representa a repulsão de troca de Pauli entre os fragmentos.

Os componentes de Morokuma foram aplicados na série de hidretos a fim de buscar generalizações sobre as contribuições de cada um dos componentes para a energia da ligação de hidrogênio. HF foi escolhido como doador e receptor de prótons de referência.

Fica evidente que a maior fonte de contribuição atrativa (sinal negativo) dentre todas é a eletrostática, com exceção de H-F --- HPH<sub>2</sub>, em que a maior contribuição é atribuída à Transferência de Carga. É importante observar que os dados das respectivas magnitudes de cada termo, demonstram a dependência tanto da distância intermolecular, quanto do ângulo da ligação.

A finalidade de apresentar a tabela é justificada pela forma mais direta de representar a contribuição de transferência de carga nas ligações de hidrogênio e

constatar que tal contribuição não é a dominante nem mesmo nas interações mais intensas.

É pertinente apontar que o objetivo do trabalho é levantar os conceitos fundamentais em relação às interações intermoleculares e como existem diferentes percepções sobre as ligações de hidrogênio, sobretudo relativo à natureza puramente eletrostática ou com certo grau covalência, isso pode influenciar no rol de principais conceitos para a compreensão de tais concepções.

É essencial que os inúmeros detalhes, que não são poucos, sobre a ligação de hidrogênio, sejam abordados, uma vez que é o tipo mais importante de interação supramolecular, atualmente apresentada como um termo primário no título, resumo ou lista de palavras-chave de mais de 10.000 publicações de pesquisa por ano (WEINHOLD; KLEIN, 2014).

A ligação de hidrogênio pode ser interpretada como uma interação de caráter exclusivamente eletrostático, sendo assim, com base no potencial de Coulomb ( $E_p \propto 1/r$ ), seria plausível que uma equação de energia de interação com dependência da distância representasse a ligação de hidrogênio.

O uso de uma equação para o cálculo da energia de ligação de hidrogênio é descrito no livro de Israechivili (2011), com a equação semelhante à da energia de interações íon-dipolo, substituindo a carga do íon pelo  $H^+$ . Logo, a energia de interação total para diversas moléculas poderia ser calculada por meio de uma equação com a somatória dos termos de contribuição de cada tipo de interação incluindo as ligações de hidrogênio.

Obviamente, existem evidências teóricas e experimentais de que a ligação de hidrogênio tem uma contribuição de transferência de carga em sua energia de interação, porém, ocorre muita discussão sobre os modelos para quantificar tal contribuição.

Ligação de hidrogênio têm contribuições eletrostáticas, de indução, dispersão, correlação de troca e covalência de transferência de carga, e tudo o que pode ser medido experimentalmente é a energia de interação, todos os métodos para a decomposição, são apenas modelos.

Um dos métodos utilizado foi a Teoria da Perturbação da Simetria Adaptada (SAPT) combinada com a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Um trabalho publicado na revista química nova discute o caráter covalente, com base na correlação

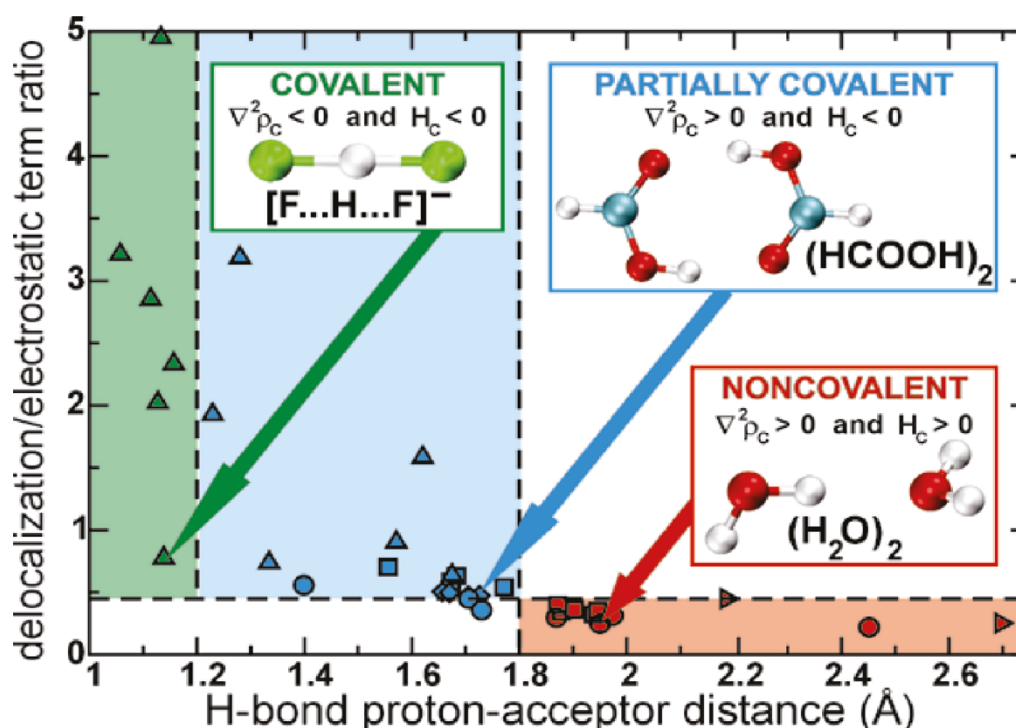
da contribuição eletrostática em função da distância interatômica via tal método, o diagrama é ilustrado na (figura 22).

Percebe-se que valores da relação deslocalização/eletrostática superiores à faixa de 0,45 relacionados com comprimento de ligação menores que 1,2 Å indicam, que os termos de polarização e transferência de carga fornecem uma parcela maior para a estabilização do sistema químico covalente como, por exemplo, o íon (HFH)<sup>-</sup>.

Para distâncias de interação maiores que 1,6 Å, há uma tendência de diminuição das contribuições de polarização e transferência de carga, em que os sistemas intermoleculares CO<sub>2</sub>H<sub>2</sub>...CO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O...H<sub>2</sub>O apresentam caráter covalente parcial e nulo, respectivamente.

Vale observar que o caráter covalente das ligações de hidrogênio, segundo os critérios estabelecidos na (figura 20), depende da relação entre os termos de contribuição de transferência de carga e eletrostático em função da distância de ligação.

Figura 20 - Classificação da covalência em interações intermoleculares através da relação entre a proporção do termo deslocalização/eletrostático e a distância da ligação de hidrogênio  $R_{(X-Y^{\delta-} \dots H^{+\delta} - Z)}$ .



Fonte: Oliveira e Araújo (2012), p. 2009.

O ânion que apresenta característica de covalência tem como participante o elemento flúor, que é sabidamente muito eletronegativo e é possível interpretar a partir de abordagens anteriores, que os ânions com flúor, apresentam considerável caráter covalente, além da característica relacionada à distância de ligação ser semelhante à de ligação covalente.

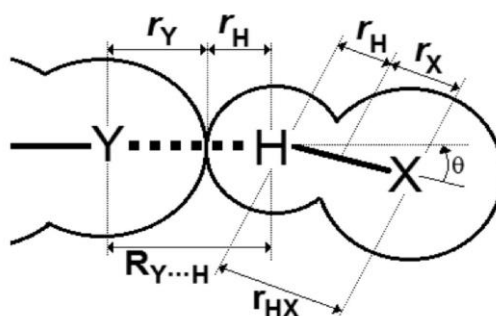
O fato da ligação de hidrogênio entre as moléculas de água apontada como uma interação de covalência nula, corrobora com o primeiro gráfico (figura 1) apresentado na discussão dos resultados do presente trabalho, em que a contribuição eletrostática é predominante.

Em suma, pode-se inferir que o grau de covalência de uma ligação de hidrogênio é fortemente relacionado com a direcionalidade de tal ligação, caracterizando a importância dos aspectos das distâncias intermoleculares e do ângulo de formação dessa interação, apesar de o último exemplo não fazer referência ao ângulo de ligação como critério.

Dados que ajudam quantificar essa direcionalidade da ligação de hidrogênio podem ser explorados, mostrando que dependendo da intensidade da ligação de hidrogênio ( $H-Y \cdots H-X$ ), há uma variação das distâncias  $R_{Y \cdots H}$  entre 1 a 3 Å, valor que deve ser menor ou igual à soma dos raios de van der Waals dos átomos Y e H (OLIVEIRA, 2015).

O ângulo formado entre os elementos YHX deve ser superior a  $110^\circ$  e o mais próximo possível de  $180^\circ$ , devido tal disposição, a ligação de hidrogênio contará com uma distância menor e maior energia (OLIVEIRA, 2015). A (figura 21) ilustra bem a identificação dos parâmetros de distância e ângulo de ligação desse tipo de interação.

Figura 21 - Ilustração dos raios atômicos ( $r_Y$  e  $r_H$ ), raios covalentes ( $r_H$  e  $r_X$ ) e ângulo ( $\theta$ ) de formação da ligação de hidrogênio.



Fonte: Oliveira (2015), p.1315.



Cabe frisar que a maioria dos livros didáticos de química geral, apresentam definições da ligação de hidrogênio como uma interação eletrostática com destaque a magnitude da energia envolvida, mas não há discussões sobre a covalência de tal interação, embora a comparação em relação à ligação covalente exista nos valores de energia dispostos em tabelas típicas.

Aliás, outro aspecto a ser considerado a respeito da ligação de hidrogênio, que corrobora com a ideia de caráter predominantemente eletrostático, são as próprias análises apresentadas de decomposição da energia de interação, que aponta a contribuição de indução, que pode incluir polarização e transferência de carga, como uma fonte de atração entre as moléculas, raramente predominante em comparação com as contribuições eletrostática e de dispersão.

Há trabalhos que tentam demonstrar que a ligação de hidrogênio pode ser abordada considerando alguns pontos já discutidos até aqui. Murthy (2006), define a ligação de hidrogênio como uma interação entre átomos específicos, como mostrado (A é o doador, B é o aceptor)  $A - H + :B \rightarrow A - H : B$ , enfraquece a ligação  $A - H$ . A distância entre H e B pode ser menor que a soma dos raios de van der Waals, e apresenta direcionalidade, geralmente a  $180^\circ$ . Em relação aos compostos A e B, A são compostos com fortes ligações covalentes polares contendo átomo de hidrogênio como parte do dipolo e B são compostos com elétrons de pares isolados ou cargas negativas ou elétrons pi.

Sobre a natureza da interação, o tipo de força pode ser classificado como doador-receptor/interação eletrostática e a energia de interação é atribuído o intervalo de 10 a 40 kJ/mol (distância de separação entre A e B  $< 0,4$  nm) ( $\sim 2$  kJ/mol para aqueles que envolvem receptores de elétrons pi) (MURTHY, 2006).

Em relação a estes últimos aspectos, a ligação de hidrogênio em função de sua energia de interação, pode ser considerada relativamente forte e é caracterizada pelo sistema  $X - H \cdots Y$ , tipicamente com uma magnitude entre 12 e 30 kJmol<sup>-1</sup>, sendo o ângulo de ligação XHY mais comum, próximo de  $180^\circ$ . Em geral, estudos estruturais indicam que a ligação  $X - H$  torna-se um pouco mais longa que em um sistema onde não há ligação de hidrogênio, enquanto a distância  $H \cdots Y$  excede em muito a de uma ligação covalente normal de HY (DESIRAJU, 2011).

A ligação de hidrogênio pode ser identificada por meio de técnicas experimentais que demonstram também a complexidade da mesma e uma das mais utilizadas é a espectroscopia vibracional na região do infravermelho.

Conforme as recomendações da IUPAC sobre a definição da ligação de hidrogênio, Arunan *et al.* (2011) relata que o comprimento da ligação X-H, geralmente aumenta na formação de ligações de hidrogênio, levando a um desvio para o vermelho na frequência de estiramento do infravermelho X-H e a um aumento na seção transversal de absorção de infravermelho para a vibração de alongamento X-H. Quanto maior o alongamento da ligação X-H em X-H---Y, mais forte é a ligação H---Y. Simultaneamente, novos modos vibracionais associados à formação da ligação H--Y são gerados.

As alterações relacionadas a frequência podem ser entendidas de duas maneiras, o efeito denominado batocrômico ou *red-shift* – deslocamento da frequência para valores mais baixos no espectro de absorção e o efeito hipsocrômico ou *blue-shift* – deslocamento da frequência para valores mais altos no espectro de absorção. A literatura científica revela que efeitos *red-shifts* são vistos em sistemas intermoleculares fortemente ligados, enquanto interações mais brandas apresentam efeitos *blue-shifts* (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Lembrando que não foi realizado um aprofundamento nos fenômenos concernentes à espectroscopia, pois o trabalho busca investigar os conceitos fundamentais para a compreensão da ligação de hidrogênio e o destaque, nesse caso, é dado às evidências desse tipo de interação elucidadas por tal técnica.

O grande desafio das técnicas experimentais se dá em associar os resultados das análises ou dados aos conceitos teóricos, ligação de hidrogênio via espectroscopia não é diferente, buscar um elo entre os deslocamentos químicos *red-shifts* e *blue-shifts* e a magnitude da interação sempre será pertinente, devido à possibilidade de relacioná-los à formação de ligações de hidrogênio e das interações de van der Waals.

É possível organizar as informações referentes as diferentes energias de interação entre as ligações de hidrogênio, principalmente correlacionando tais magnitudes com os comprimentos e ângulos de ligação. No entanto, é fundamental que as ligações de hidrogênio denominadas não clássicas sejam brevemente apresentadas.

Mesmo com os fundamentos das propriedades teóricas das ligações de hidrogênio, outras importantes interações como as ligações de di-hidrogênio, ligações de hidreto, ligações agnósticas, ligações de halogênio, ligações halogênio-hidreto e *stacking*, são consideradas por muitos pesquisadores, como parte que integra o conjunto de interações intermoleculares modernas (quadro 6) (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Quadro 6 – Ligações de hidrogênio não clássicas

Ligações de hidrogênio	Definição	Estruturas
ligação di-hidrogênio	Complexos de dihidrogênio são caracterizados por interações intermoleculares formadas por doadores de hidrogênio $H^{\delta+}$ (átomos de hidrogênio presentes nas ligações N–H, O–H, C–H, H–F e H–Cl) e grupos hidretos $H^{\delta-}$ provenientes de metais alcalinos ou alcalinos terrosos.	$BeH_2^{\delta-} \cdots ^{\delta+}HCF_3$
ligações de hidreto	Indicam as características de aceitação de prótons das ligações $\sigma$ , uma vez que estas podem ser tratadas como base de Lewis.	$X-H \cdots \sigma$ $\pi \cdots H \cdots \sigma$ $\sigma \cdots H \cdots \sigma$
ligações agnósticas	São classificadas como manifestações de interações covalentes entre grupos carbono-hidrogênio e centros de metais de transição em compostos organometálicos.	
ligação de halogênio	Interação de ligação fraca entre um átomo de halogênio polarizável X em uma espécie molecular R–X que atua como o ácido de Lewis e um sítio atômico nucleofílico Y (como oxigênio, nitrogênio ou enxofre) em uma espécie molecular vizinha (Y – R').	$CFCl_3 \cdots O_3$
ligações halogênio-hidreto	O átomo de halogênio atua como um centro de ácido de Lewis e o átomo de H, com um excesso de carga negativa, como uma base de Lewis.	$LiH \cdots FCF_3$
stacking $\pi$ - $\pi$	Interações intermoleculares atrativas entre anéis aromáticos, uma vez que contêm ligações $\pi$ .	

Fonte: Oliveira, Araújo e Ramos (2011), Grabowski (2006), Brookhart (2007), Mohajeri (2010), Oliveira *et al* (2011) e Parthasarathi (2005).

As ligações de hidrogênio não clássicas já são muito retratadas nas publicações da área de química, mas ainda não são introduzidas na abordagem das interações intermoleculares nos materiais didáticos e livros-texto de graduação em química, em especial em química geral e físico-química.

Devido à importância das ligações de hidrogênio não clássicas, deve-se proporcionar apresentação delas, mesmo que minimamente na graduação, principalmente quando estas exercem papéis importantes, desde a estrutura do DNA (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2010) até os clorofluocarbonetos na camada de ozônio (OLIVEIRA *et al.*, 2011).

Como foi possível observar, existem algumas diferenças entre as ligações de hidrogênio, demonstrando que propriedades físico-químicas e parâmetros como distâncias e ângulos de ligação, podem influenciar na natureza e conseqüentemente caráter covalente das ligações de hidrogênio. A (tabela 8) mostra alguns aspectos das ligações de hidrogênio correlacionados com a respectiva magnitude energética.

Tabela 8 - Propriedades e características das ligações de hidrogênio.

	<b>Forte</b>	<b>Moderada</b>	<b>Fraca</b>
Interação X – H --- Y	covalente	Parcialmente covalente	eletrostática
Energia de ligação (kJmol <sup>-1</sup> )	60-120	16-60	<12
Comprimento da ligação (Å)			
H --- Y	1,2-1,5	1,5-2,2	2,2-3,2
X --- Y	2,2-2,5	2,5-3,2	3,2-4,0
Ângulo da ligação (°)	175-180	130-180	90-150
Deslocamento relativo* (cm <sup>-1</sup> )	25%	10-25%	<10%
Exemplos	(H – F --- F) <sup>-</sup>	(O – H --- O – H)	(O – H --- π)

\* IV vibracional (estiramento simétrico).

Fonte: Steed e Atwood (2009), p. 30.

A energia de interação das ligações de hidrogênio está relacionada com a natureza dos átomos participantes da interação, como doadores e aceptores de prótons. Ligações de hidrogênio que são classificadas como fortes, são aquelas em que os átomos que estão associados ao hidrogênio, X e Y (X–H---Y), são altamente eletronegativos ou quando Y está carregado, nesses casos, a energia de interação é similar à de uma ligação covalente, como no caso do ânion HF<sub>2</sub><sup>-</sup> (F – H --- F<sup>-</sup>).

As ligações de hidrogênio denominadas moderadas, são formadas por doadores e aceptores neutros, como no caso da água (O–H---H). E as ligações de hidrogênio fracas, são formadas quando não há muita diferença de eletronegatividade entre os doadores e o átomo de hidrogênio. As espécies X e Y podem não ser convencionais (anéis aromáticos, ligações π, etc), como foram abordadas nas ligações de hidrogênio não clássicas.

As recomendações da IUPAC sobre alguns critérios fundamentais para a caracterização de uma ligação de hidrogênio ( $X-H\cdots Y-Z$ ) podem ser elencadas abaixo, segundo Arunan *et al.* (2011):

1. As forças envolvidas na formação de uma ligação de hidrogênio incluem as de origem eletrostática, aquelas que surgem da transferência de carga entre o doador e o aceptor, conduzindo a formação de ligações covalentes parciais entre H e Y e as originadas por dispersão.

2. Os átomos X e H são covalentemente ligados entre si e a ligação X-H é polarizada, aumentando a força de ligação H $\cdots$ Y com o aumento da eletronegatividade de X.

3. O ângulo X-H $\cdots$ Y é geralmente linear ( $180^\circ$ ) e quanto mais próximo o ângulo estiver de  $180^\circ$ , mais forte é a ligação de hidrogênio e menor a distância H $\cdots$ Y.

4. O comprimento da ligação X-H geralmente aumenta na formação de ligações de hidrogênio, levando a um desvio para o vermelho na frequência de estiramento do infravermelho X-H e um aumento na seção transversal de absorção de infravermelho para a vibração de alongamento X-H. Quanto maior o alongamento da ligação X-H em X-H $\cdots$ Y, mais forte é a ligação H $\cdots$ Y. Simultaneamente, novos modos vibracionais associados à formação da ligação H $\cdots$ Y são gerados.

5. A ligação de hidrogênio X-H $\cdots$ Y-Z leva a assinaturas de RMN, que tipicamente incluem a liberação de prótons pronunciada para H em X-H, através de acoplamentos de spin de ligações de hidrogênio entre X e Y e Overhauser nuclear.

6. A energia de formação de Gibbs para a ligação de hidrogênio, deve ser maior que a energia térmica do sistema, para que a ligação de hidrogênio seja detectada experimentalmente.

A partir das recomendações da IUPAC, vale destacar, que a energia das ligações de hidrogênio é uma composição de contribuições de caráter eletrostático, dispersivo e de transferência de carga. Ressalta-se, também, que o ângulo e comprimento de ligação, podem causar mudanças na magnitude da energia de ligação. E por último, há técnicas que podem identificar as ligações de hidrogênio experimentalmente e contribuir para sua caracterização.

Grande parte dos trabalhos selecionados exploram, mesmo que muitas vezes no tópico de introdução, a relação das ligações de hidrogênio com propriedades físico-

químicas, algo que se destaca tanto nos livros didáticos quanto na literatura científica, devido ao número de evidências, aplicações e fenômenos que podem ser conectados diretamente a essas interações.

Inicialmente é essencial apontar uma propriedade, geralmente as temperaturas de ebulição, onde a intensidade das ligações de hidrogênio provoca discrepâncias nas forças de atração entre as moléculas, evidente na interpretação dos dados.

Apesar das ligações de hidrogênio serem consideradas muito relevantes no contexto das interações, por suas forças de ligações, uma hipótese para explicar o fato, de grande parte dos estudantes lembrarem-se das ligações de hidrogênio ao serem questionados sobre o tema interações intermoleculares, pode ser vinculada as inúmeras aplicações e exploração da mesma para interpretação de processos.

Antes de organizar os conceitos principais, que emergiram dos trabalhos selecionados na abordagem do tema ligação de hidrogênio. É fundamental apontar esses fenômenos citados e relacionados a tais interações, que na maioria das vezes, ficam restritos a parte de introdução dos artigos.

As interações intermoleculares, sobretudo as ligações de hidrogênio são responsáveis por determinar muitas propriedades das substâncias como: ponto de fusão, ponto de ebulição, viscosidade, tensão superficial e assim por diante. As interações entre moléculas exercem influência significativa nas reações químicas, na eficácia das separações cromatográficas e no reconhecimento molecular em processos biológicos (MURTHY, 2006).

Existem estudos que relacionam essas interações com fenômenos incomuns, por exemplo, pesquisadores alertam que o desenvolvimento da medicina perioperatória, referente à elucidação do mecanismo de anestesia no sistema nervoso central, está absolutamente relacionado ao conhecimento das propriedades das ligações de hidrogênio. Outras investigações mostraram, que os dados espectroscópicos das ligações de hidrogênio, explicam o fenômeno da coloração azulada dominante nas águas do Caribe e Mar Mediterrâneo (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Em síntese geral, após a compilação do conhecimento químico envolvido na compreensão da ligação de hidrogênio, com base nos trabalhos selecionados das

principais bases de dados e revistas da área de educação química, há a intenção de especificar os conceitos fundamentais sobre o tema e as suas interligações.

A ligação de hidrogênio pode ser definida como uma interação inteiramente eletrostática, correspondente à ligação entre um átomo eletronegativo e um átomo de hidrogênio, que por sua vez interage com outro átomo relativamente eletronegativo. Essa interação é permitida, muito pelo tamanho do hidrogênio, que facilita a aproximação de cargas ou polos.

O conceito de interações eletrostáticas é a base para o entendimento da ligação de hidrogênio, além do entendimento de parâmetros que são essenciais na interpretação de tal interação, como o raio atômico e a eletronegatividade. Dois equívocos comuns no processo de ensino da ligação de hidrogênio e podem ser destacados nessa primeira definição se referem à exclusividade de átomos mais eletronegativos (N, O e F), para a formação da ligação de hidrogênio e quanto à possibilidade da existência de ligações de hidrogênio intramoleculares.

Existem alguns dados que não estão de acordo com a perspectiva do caráter inteiramente eletrostático, como a não existência de correlação linear entre a energia da ligação de hidrogênio e o momento dipolar das substâncias, a distância entre os átomos participantes da ligação de hidrogênio, que é menor que a soma dos raios de van der Waals, o que provoca interações repulsivas, que são desconsideradas pelo tratamento eletrostático e a redistribuição de carga evidenciada por espectroscopia.

As percepções relacionadas ao caráter covalente da ligação de hidrogênio, são baseadas nas definições que assumem a interação de doador-receptor entre o hidrogênio e o segundo átomo Y ( $X - H \cdots Y$ ). Para interpretar essa interação temos diferentes vias, uma caracterizada como uma ressonância intermolecular ou compartilhamento parcial do tipo  $3c/4e$ . A que considera a interação como uma transferência parcial de próton entre bases de Lewis competidoras. E a interação entre os orbitais antiligante  $\sigma^*$  como doador de H e não ligante como receptor de H.

Essa última via mostra, que o caráter covalente da ligação de hidrogênio, é fundamentado pela transferência de carga, o que torna esse conceito fundamental para plena compreensão desse aspecto de caráter covalente. A ideia de ressonância da ligação covalente, que junto aos conceitos de estruturas de Lewis, também exercem papel essencial na perspectiva conceitual, principalmente para possibilitar novas definições propostas sobre covalência da ligação de hidrogênio.

Duas definições interessantes, que demonstram as inquietações relacionadas ao fenômeno da ligação de hidrogênio, são descritas no trabalho de Oliveira (2015) e corroboram com o que foi investigado, a primeira considera que o átomo de hidrogênio pode se ligar simultaneamente a dois outros átomos e a segunda destaca a capacidade do hidrogênio de atuar como elo entre dois átomos.

Concentrando-se nos conceitos fundamentais sobre a ligação de hidrogênio, o caráter covalente é também defendido pela energia de tal interação que é superior à de outras interações intermoleculares. Nesse sentido, o entendimento do potencial de interação da ligação de hidrogênio e os principais parâmetros que estão correlacionados a magnitude de tal interação como o comprimento e ângulo de ligação são essenciais.

Distâncias menores de interação entre o hidrogênio e o receptor de próton e ângulos de ligação mais próximos de  $180^\circ$ , tendem a constituir ligações de hidrogênio mais intensas e com maior caráter covalente, desse contexto emerge um conceito também essencial na compreensão desse tipo de interação que é a direcionalidade das ligações.

As relações entre energia da ligação de hidrogênio, distância e ângulo da ligação podem sugerir o grau de covalência. A ligação de hidrogênio ( $X-H\cdots Y$ ) é essencialmente eletrostática para as ligações longas ( $d_{X-Y} > 2,8\text{\AA}$ ) e para as ligações curtas ( $d_{X-Y} \leq 2,5\text{\AA}$ ) a contribuição do termo covalente torna-se mais apreciável.

Uma das metodologias utilizadas para auxiliar na interpretação da natureza das interações intermoleculares, também é imprescindível na abordagem das ligações de hidrogênio. Logo, no elenco dos conceitos fundamentais, tem que haver espaço para a análise de decomposição de energia de interação total, que suportada pela química quântica, pode apontar as contribuições eletrostáticas, dispersivas, de indução, de transferência de carga e de repulsão.

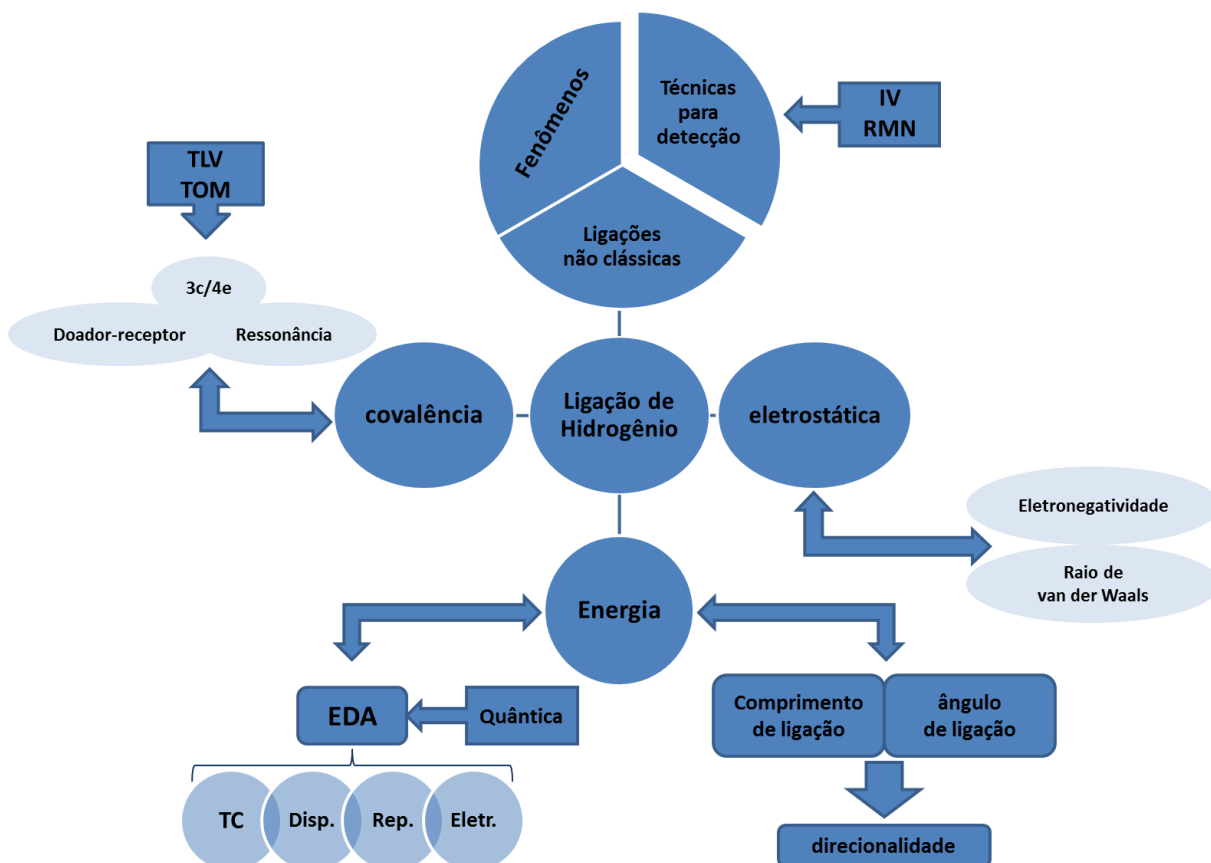
Tais contribuições são importantes para a compreensão da natureza da ligação de hidrogênio e fundamentar as conclusões sobre o caráter covalente que pode ser associado à transferência de carga.

Conclui-se, que ainda faz-se necessária uma abordagem das ligações de hidrogênio denominadas não clássicas e há pertinência na discussão de técnicas que são utilizadas para detectar as ligações de hidrogênio, sobretudo as que estão presentes nas recomendações da IUPAC, como espectroscopia na região do



infravermelho e ressonância magnética nuclear. Além de aplicações e fenômenos interpretados com base nas ligações de hidrogênio em diversas áreas da ciência. A (figura 22) representa o esquema que resume os conceitos fundamentais, parâmetros e as suas relações acerca da ligação de hidrogênio.

Figura 22 - Conceitos fundamentais sobre ligação de hidrogênio com base na pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

O esquema que sintetiza os conceitos considerados destaques através da análise dos artigos selecionados e podem contribuir com a elaboração do mapa que detalha melhor as inter-relações entre os conteúdos conceituais sobre as ligações de hidrogênio.

Os trabalhos demonstram o caráter dinâmico da ciência e o próprio tema ligação de hidrogênio como um conhecimento que continua em construção,

considerando os estudos sobre a natureza eletrostática e discussão sobre o caráter covalente de tal ligação.

A covalência que é expressa através dos fundamentos da Teoria do Orbital molecular e modelos quântico-computacionais que conseguem calcular as contribuições que caracterizam a covalência da energia de ligação.

Nesse contexto, é importante a noção dos parâmetros que podem auxiliar na classificação da direcionabilidade da ligação de hidrogênio e a sua respectiva intensidade por meio dos ângulos e distâncias intermoleculares típicas desse tipo de interação molecular.

Após os principais achados e ideias presentes nos artigos selecionados, com enfoque nas ligações de hidrogênio, um mapa conceitual foi organizado (Apêndice E) com o propósito de evidenciar a rede de conceitos que representa o conhecimento químico sobre as ligações de hidrogênio através da análise dos artigos selecionados, principalmente destacando as relações entre esses conceitos.

### 6.1.4 Equação de van der Waals

A maioria dos trabalhos que tratam das interações intermoleculares ao realizarem uma abordagem histórica, apontam a equação de van der Waals, como expressão científica pioneira na consideração das forças atrativas e repulsivas existentes entre átomos e moléculas (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015).

É importante pontuar em que contexto há o estabelecimento de tal equação, lembrando que ela é proveniente de ajustes da equação para os gases ideais. Gases são compreendidos como moléculas ou átomos mais afastados uns dos outros e em movimento, que são minimamente influenciados pelas forças intermoleculares. Em condições normais de temperatura e pressão, a maior parte dos gases reais apresenta comportamento de gases ideais e os desvios desta idealidade são comuns em baixas temperaturas ou altas pressões.

Nas transições de fase e nas condições citadas tornam-se fundamentais as interações entre as moléculas gasosas e o tamanho delas, necessárias equações mais complexas para descrever tais fenômenos. A descrição mais realística do comportamento dos gases é dada pela equação de van der Waals.

$$\left(p + a \left(\frac{n}{V}\right)^2\right)(V - nb) = nRT$$

As ideias essenciais acerca da equação, que emergiram da análise dos artigos, estão relacionadas ao processo histórico-científico, que culminou nas correções representadas pelos parâmetros **a** e **b**, a discussão do significado de tais parâmetros, além de outras contribuições da equação no estudo dos gases e até uma proposta de uma equação alternativa ao modelo tradicional de representação.

O primeiro trabalho selecionado explica que as interações intermoleculares foram objeto de estudos por quase três séculos. Se as moléculas de gases reais se condensam em líquidos e se congelam em sólidos, era de se esperar existirem forças atrativas entre elas (FARINA *et al.* 2013).

Em 1873, o físico holandês Johannes Diderik van der Waals sugeriu na sua tese, uma equação de estado para gases reais, dada para um mol de gás por  $(P + a/V^2)(V - b) = RT$ , onde  $P$ ,  $V$  e  $T$  são, respectivamente, a pressão, volume e temperatura absoluta do gás,  $R$  é a constante universal e,  $a$  e  $b$  são dois parâmetros ajustáveis. O parâmetro  $b$  foi introduzido com o objetivo de considerar os volumes

finitos das moléculas, enquanto o termo  $a/V^2$  está relacionado à existência de forças intermoleculares atrativas. Essas forças atrativas, são denominadas forças de *van der Waals*, que podem se distinguir em três tipos: a força de orientação, a força de indução e a força de dispersão (MURTHY, 2006; FARINA *et al.*, 2013).

Grande parte dos artigos que apresentam o contexto histórico da equação de van der Waals, que tem como informação pertinente, o desenvolvimento do trabalho da tese de doutorado dele, defendida em 1873, além de diferentes definições dos parâmetros **a** e **b** da equação.

Uma das publicações aponta o estudo dos gases antes da equação de van der Waals, pontuando que durante a segunda metade do século XVII, o cientista britânico Robert Boyle, propôs uma relação entre pressão e volume ao estabelecer que a temperatura constante, a pressão e o volume de um gás são inversamente proporcionais, relação que recebe o nome de “Lei de Boyle” (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015).

Em seguida, houve uma maior demanda da comunidade científica pelo estudo da zona de transição líquido-vapor, que aumentou consideravelmente, com o surgimento do motor a vapor durante o século XVIII. No início do século XIX, o físico francês Joseph-Louis Gay-Lussac, postulou que a pressão de um gás, com massa e volume definidos, é diretamente proporcional na temperatura absoluta, que daria origem à lei que leva seu nome (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015).

Ao reunir as propostas de Boyle e Gay-Lussac, surge a lei dos gases ideais que foi a primeira equação de estado, capaz de descrever o estado de agregação de um mol de uma determinada substância, ao apresentar uma relação entre pressão (P), volume (V), a temperatura absoluta (T), reunida na constante molar de gases (R).

$$PV = RT$$

Antes da equação de van der Waals, já sabia-se que sob pressão maior que 1 atm, o comportamento de um mol de gás e/ou vapor pode ser representado de uma forma simples ao entrar na equação ideal um parâmetro ajustável **b** (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015):

$$P(V-b) = RT$$

O parâmetro **b** foi adicionado à equação de estado, no entanto, não foi suficiente para interpretá-lo como o volume ocupado pelas moléculas de um gás.

Após a modificação, por van der Waals, da Lei de Boyle e Gay-Lussac, ao considerar que as moléculas ocupam espaço, exercem atração entre elas e possui uma forma esférica impenetrável, a equação de estado de uma molécula de gás não ideal foi descrita como:

$$\left(p + a \left(\frac{n}{V}\right)^2\right)(V - nb) = nRT \quad (1)$$

O parâmetro **b** representa o volume excluído por moléculas (repulsão entre moléculas) e está diretamente relacionado ao volume molar da substância (V) (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015).

Segundo Vega e Gracia-Fradique (2015) considerando duas partículas adjacentes, esféricas, duras e de tamanho igual, seus centros de massa não podem se aproximar a uma distância menor que **d**, que é o raio de uma esfera de volume excluído, proibido para o centro de outras partículas. Se o centro de uma terceira partícula entrar na esfera que envolve os dois primeiros, significaria que esta terceira partícula, penetrou qualquer uma das duas primeiras esferas, o que é impossível. O volume excluído em um par de partículas é:

$$\frac{4\pi}{3}d^3 = \frac{32\pi}{3}r^3$$

Se  $V_0$  é o volume de uma esfera, então, o volume excluído por partícula é metade do volume excluído para um par de partículas, isto é,  $4V_0$ . Se **b** é o volume excluído por uma partícula, então (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015):

$$b = 4V_0$$

Considerando que o volume de uma esfera ( $V_0$ ) é  $4\pi r^3/3$  e o volume excluído por partícula (**b**) é  $16\pi r^3/3$ , temos que o parâmetro **b** é o quádruplo de  $V_0$ .

A equação de van der Waals, também apresenta o parâmetro **a** representando a atração entre as moléculas, indica a magnitude da força de coesão e o seu efeito é a redução da pressão (VEGA; GRACIA-FADRIQUE, 2015). Assim, a equação de van der Waals foi a primeira equação de estado que corrige a Lei Dos Gases Ideais para interações intermoleculares, logo, o volume do gás foi corrigido pelo volume ocupado de moléculas no gás, com a constante **b** representando as interações intermoleculares repulsivas e a pressão corrigida pelo parâmetro **a** que trata das interações intermoleculares atrativas.

A partir de uma perspectiva conceitual é importante compreender a evolução das equações de estado, sobretudo a partir do comportamento dos gases ideais até a equação de van der Waals para os gases reais. Entender principalmente, a introdução e importância das constantes  $a$  e  $b$  para o estudo das interações intermoleculares. Sendo o termo  $b$  subtraído do volume para explicar dimensões finitas das moléculas e o termo  $a/V^2$  adicionado à pressão externa para explicar as forças intermoleculares atrativas agora conhecidas como forças de van der Waals.

Como em outras grandes descobertas no conhecimento científico, van der Waals reúne e unifica a maior parte do conhecimento experimental referente às propriedades dos fluidos existentes até o momento numa só equação.

É possível inferir, que equação de van der Waals pode ser caracterizada como não tão rigorosa e exata, mas apenas uma entre muitas equações que foram encontradas eficientes para descrever as propriedades dos gases e transições de fase gás-líquido.

É importante considerar que a ideia de interações entre átomos e moléculas sempre existiu, inicialmente com especulações até o século XIX, em que o advento dos conhecimentos da estrutura molecular da matéria, demonstraram que as interações intermoleculares influenciavam nas propriedades da matéria. Porém, o conceito de que as moléculas se repelem a curto alcance e se atraem a uma distância maior, é fundamental na compreensão do tema e a equação de van der Waals teve papel fundamental nisso.

Segundo Myers (1999), mesmo que de forma aproximada, a equação de van der Waals mostra qualitativamente, as principais características do comportamento dos gases não ideais, e aponta os fatores que determinam a posição do ponto crítico líquido-gás, e define a faixa de existência de líquidos.

Murthy (2006), também apresenta aspectos sobre a equação de van der Waals num espaço denominado “história das interações não covalentes”. Segundo o autor, o início de pesquisas sobre o tema deu-se em 1743, por Clairault, que sugeriu forças interpartículas entre vidro e água, para explicar o fenômeno de capilaridade, entretanto, a relação entre as propriedades de matéria e a interação entre átomos ou moléculas começaram a surgir no século XIX, com a derivação da equação de estado de gás ideal.

Em livros didáticos de química geral, a maior parte destaca que a equação de van der Waals foi desenvolvida para corrigir os erros que resultam do comportamento não ideal dos gases. Os parâmetros **a** e **b** são apresentados como parâmetros de ajuste da equação para gases reais. Visser (2011) apresenta uma proposição que visa de substituir tais constantes por variáveis que podem ser medidas experimentalmente, também, constantes físicas. Se a constante **b** de van der Waals está relacionada à adição dos volumes das moléculas individuais no sistema, pela mecânica quântica, a definição do volume molecular torna-se difícil, devido à dependência de uma função de probabilidade da nuvem de elétrons. No entanto, ao utilizar funções de probabilidade para o volume molecular, a partir de cálculos quânticos, encontrou-se uma correlação linear com a polarizabilidade, que também tem unidades de volume. Na verdade, foi observada uma forte correlação entre as constantes **a** e **b** e a polarizabilidade de mais de 130 moléculas, dados que sustentam a proposta de uma nova equação de estado com constantes físicas, polarizabilidade molecular, potencial de ionização e o número de Avogadro (VISSER, 2011).

$$p(V - 8\pi N_A \alpha) = RT e^{\left[-\left(\frac{5\pi}{128}\right)\left(\frac{IN_A \alpha}{RTV}\right)\right]} + \frac{5\pi^2}{16} \frac{IN_A^2 \alpha^2}{V^2}$$

Assim, a equação acima é derivada empiricamente com base nas correlações encontradas e é uma função de estado termodinâmica única, que inclui variáveis mensuráveis experimentalmente e constantes físicas apenas, em contraste com as equações de estado mais relatadas na literatura, que contêm um ou mais parâmetros de ajuste (VISSER, 2011).

Na perspectiva do ensino das interações intermoleculares, a proposta de uma equação de estado, que substitui os parâmetros de correção **a** e **b** por um parâmetro molecular como a polarizabilidade, tem potencial para ressaltar ao aluno a centralidade da polarizabilidade nos processos de interações intermoleculares.

Assim, pode ser útil um aprofundamento de toda a dinâmica matemática envolvida, na substituição dos parâmetros **a** e **b** pelas constantes físicas e parâmetros moleculares, no contexto do processo de ensino das interações intermoleculares na graduação em química.

Du e Zheng (2018), afirmam, no contexto do ensino de física estatística, que a equação de van der Waals é fundamental para a compreensão dos alunos, sobre as propriedades estatísticas de um gás. Substituindo  $R$  por  $Nk$ , onde  $N$  é o número de

Avogadro e  $k$  a constante de Boltzmann, a forma padrão da equação de van der Waals também pode ser escrita por:

$$\left(p + a \left(\frac{n}{V}\right)^2\right)(V - b) = NkT$$

onde  $p$  é a pressão do gás,  $V$  é o volume,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $N$  é o número de Avogadro, **a** e **b** são os coeficientes de modificação da pressão e do volume, respectivamente, devido à introdução de interações intermoleculares em um gás real, como anteriormente apontado.

Os autores destacam, que na física estatística tradicional, existem procedimentos utilizados para compreender a equação de van der Waals, como o segundo coeficiente do virial. Se as interações intermoleculares podem ser expressas pelo potencial de Lennard-Jones,

$$\varphi(r) = \varphi_0 \left[ \left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 \right]$$

então, usando o segundo coeficiente virial, os coeficientes de modificação **a** e **b** na equação de van der Waals, podem ser expressos como

$$a = \frac{2\pi}{3} N^2 \varphi_0 r_0^3, \quad b = \frac{2\pi}{3} N r_0^3$$

onde  $\varphi_0$  é o potencial de interação quando a distância entre duas moléculas é  $r = r_0$ , assim como o trabalho anterior, há uma modificação da equação de van der Waals, neste caso, usando o potencial de interação no equilíbrio entre as forças atrativas e repulsivas (DU; ZHENG, 2018).

Assim, o principal destaque desse trabalho seria o cálculo dos parâmetros **a** e **b**, a partir de do potencial de interação e a distância intermolecular.

De acordo com Dean (2013), através do parâmetro **b** de van der Waals, há um método para determinar o que é denominado de raio de van der Waals. Ao considerar um mol de gás monoatômico, inerte quimicamente, há um limite de aproximação de um átomo a outro, que é a distância  $2r_{\text{Átomo}}$ , o diâmetro do átomo. E esta distância pode ser obtida pela equação  $b = 2\pi N(2r_{\text{Átomo}})^3/3$ , em que  $N$  é o número de Avogadro.

O autor levanta a discussão sobre alguns fatores que podem interferir na determinação do raio de van der Waals, destacando que, os raios de vdW podem não ser independentes da direção de uma interação.



Os raios também são afetados pela fase física da(s) molécula(s) de interesse, os raios apropriados para o estado sólido, não são geralmente apropriados para a fase gasosa ou para cálculos de propriedades para moléculas isoladas. Além disso, o raio de vdW de um átomo é afetado pela natureza de outros átomos ligados a ele. Portanto, grande cuidado deve ser tomado na escolha de raios vdW apropriados para qualquer aplicação em particular, os valores apropriados podem simplesmente não estar disponíveis na literatura (DEAN, 2013).

O trabalho evidencia que os alunos de graduação, devem estar cientes que os valores únicos dos raios de van der Waals, podem ser muito aproximados por não considerar, a anisotropia, a dependência de fase física e de outros átomos em uma molécula, especialmente átomos diretamente ligados e a influência sobre estrutura e estabilidade molecular, através de interações intramoleculares.

Dois aspectos relevantes que emergem desse trabalho, é o fato de um dos parâmetros da equação de van der Waals ser utilizado para determinar os raios de van der Waals e que muitos fatores relacionados a interações inter e intramoleculares, devem ser considerados na obtenção dos valores amplamente encontrados na literatura, como o raio de van der Waals, sem a devida discussão da forma como foram obtidos, esse aspecto pode ser explorado no contexto da área de ensino, sobretudo no tema interações intermoleculares.

Em síntese, a equação de van der Waals pode ser considerada um conceito fundamental na abordagem do tema interações intermoleculares, uma vez que a natureza e existência das interações é investigada a partir da inserção das constantes  $a$  e  $b$  na equação dos gases ideais, para melhor interpretação do comportamento dos gases ideais e líquidos.

O parâmetro  $a$  é adicionado à pressão e representa o termo atrativo da equação de van der Waals e  $b$  representa o termo repulsivo, sendo subtraído do volume, como correção referente ao volume efetivo em que átomos e/ou moléculas são consideradas como esferas. Como os valores de tais constantes podem ser obtidos experimentalmente, eles são comumente dispostos em tabelas de livros didáticos no tópico que trata da lei dos gases ideais.

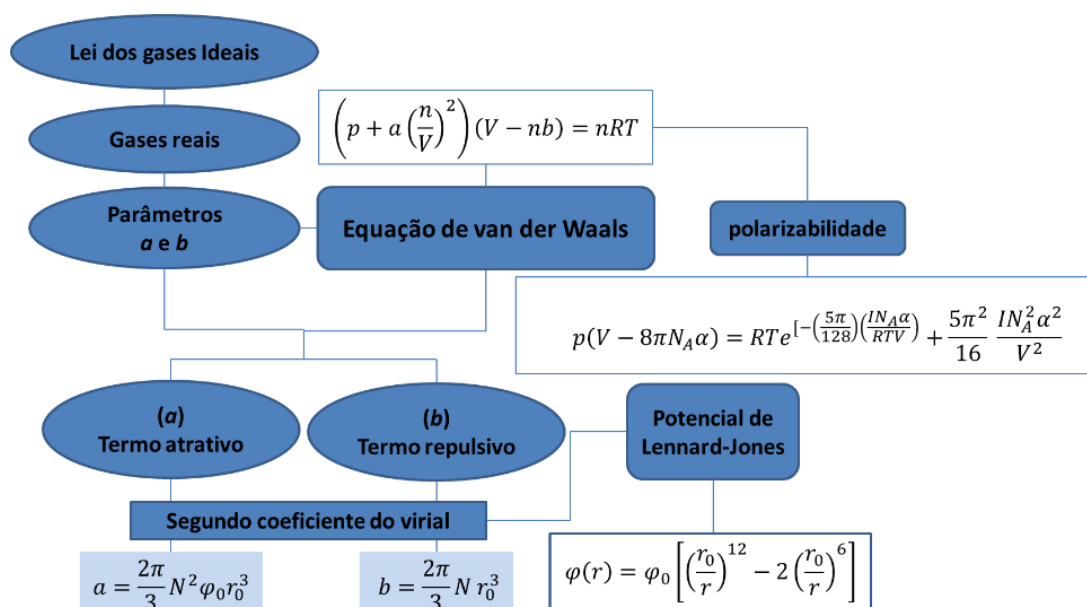
Do ponto de vista conceitual, existe a possibilidade de, utilizando uma ferramenta matemática, relacionar os parâmetros de van der Waals, com a energia de

interação e separação intermolecular, presentes no potencial de Lennard-Jones e expressos através de uma equação para calcular os valores de **a** e **b**.

Uma contribuição no sentido de alternativas para a aprendizagem das interações intermoleculares, é a proposta de uma nova equação de estado, em que as principais alterações são as substituições dos parâmetros **a** e **b** por constantes físicas, que podem ser medidas, como potencial de ionização e a polarizabilidade molecular. O estudo correlaciona os dados de mais de 130 moléculas e conclui que a equação de van der Waals pode ser reduzida ao parâmetro de volume, a polarizabilidade, demonstrando a importância desta propriedade molecular para a compreensão das interações entre as moléculas.

A (figura 23) representa o esquema que resume os conceitos fundamentais, parâmetros e as suas relações acerca da equação de van der Waals.

Figura 23 - Conceitos fundamentais sobre equação de van der Waals com base na pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

Foi possível observar, que quando se pensa na equação de van der Waals, muitos pontos devem ser considerados, o resgate histórico da relevância da introdução dos parâmetros **a** e **b** para compreender o comportamento dos gases reais e novas propostas de modificações da equação para facilitar o entendimento e aplicabilidade no contexto das interações intermoleculares.

Através da aplicação do segundo coeficiente do virial, os termos **a** e **b** podem ser reescritos em função do potencial de interação de Lennard-Jones e da distância intermolecular. Característica também explorada, é a proposta de uma nova equação, através da correlação entre as constantes **a** e **b** e a polarizabilidade molecular.

Essa nova equação substitui tais constantes por parâmetros como energia de ionização, número de Avogadro e em especial a polarizabilidade e tem o potencial de facilitar a aprendizagem à medida que torna a existência e compreensão da natureza das forças atrativas e repulsivas menos abstratas.

Após a análise e discussão das principais informações e ideias presentes nas publicações selecionadas, com enfoque na equação de van der Waals, um mapa conceitual foi organizado (Apêndice E) com o propósito de evidenciar a rede de conceitos que representa o conhecimento químico sobre a equação de van der Waals, através da análise dos artigos selecionados, principalmente, destacando as relações entre esses conceitos.

### **6.1.5 Propriedades físico-químicas**

A última ideia-chave reúne artigos selecionados da pesquisa bibliográfica sobre propriedades físico-químicas, mostra a importância para a plena compreensão das interações intermoleculares e trata das propriedades físico-químicas e fenômenos relacionados ao tema, sobretudo os conceitos fundamentais e as suas conexões.

Algumas publicações destacam as correlações entre propriedades físico-químicas das substâncias químicas, com as interações intermoleculares, no sentido de expor a importância da origem e natureza das interações. Também há trabalhos que buscam formas de melhorar a compreensão dessas correlações, principalmente em relação a erros comumente mencionados, como a tendência de propriedades, segundo as características moleculares dos compostos químicos e o papel de contribuição didática dos fenômenos para melhorar o entendimento do tema.

Alguns desses equívocos cometidos pelos estudantes em meio aos diversos problemas que afetam o processo de ensino de química, podem ser conceitos e ideias pertinentes do período de ensino médio e cursos preparatórios para o vestibular, como, por exemplo, “semelhante dissolve semelhante”, relacionando apenas

polaridade à solubilidade e “aumento da cadeia, haverá aumento do ponto de ebulição” ao abordar as relações entre as interações e pontos de ebulição.

As propriedades físico-químicas mais utilizadas, nos artigos selecionados, visando promover a compreensão do papel das interações intermoleculares são: pontos de fusão e ebulição, entalpias e entropias de vaporização, solubilidade, tensão superficial e viscosidade.

De acordo com Murthy (2006), um dos principais objetivos da educação química, é fazer com que os alunos entendam a relação entre a estrutura molecular ou constituição da matéria e as suas propriedades. Tal relação é a ferramenta que pode levar ao desenvolvimento de novos materiais e processos.

Os primeiros artigos a serem abordados sobre aspectos referentes às propriedades físico-químicas, demonstram que alguns conceitos devem ser amplamente discutidos para que não influenciem na aprendizagem do tema.

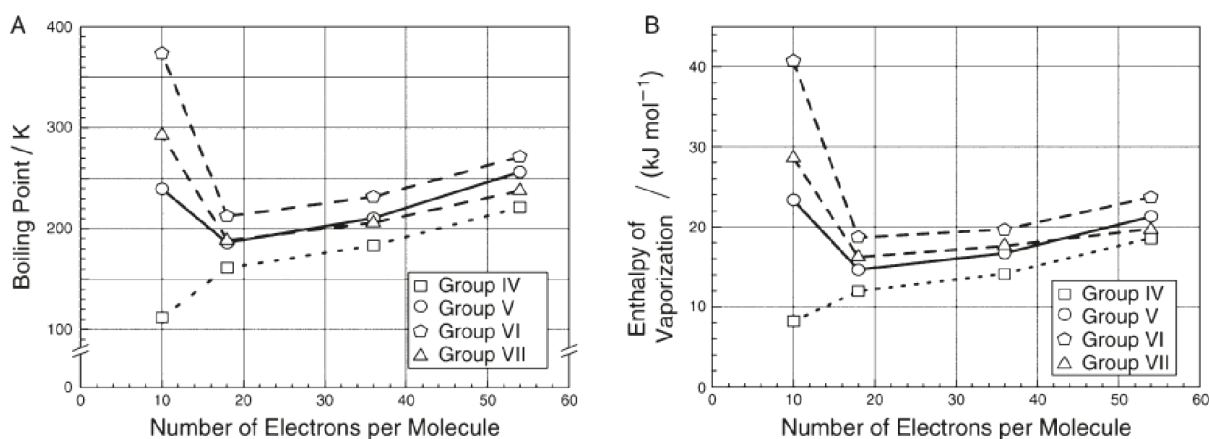
Glazier, Marano e Eisen (2010) apresentam a tendência dos pontos de ebulição de hidretos dos grupos IV-VII, como uma forma de introduzir as interações intermoleculares no início da graduação em química.

De acordo com Glazier, Marano e Eisen (2010), existem diversos fatores que contribuem para o ponto de ebulição das substâncias químicas, mas a ideia é utilizar os pontos de ebulição para examinar as interações intermoleculares. Dentre os parâmetros usados como uma medida das interações intermoleculares, a entalpia de vaporização é sugerida como a mais direta, mas na perspectiva de ensino, o ponto de ebulição é mais utilizado, pois além de apresentar dependência similar, em cursos introdutórios de química, faz sentido falar de uma propriedade (ponto de ebulição) com a qual, os estudantes estão mais familiarizados.

Para representar os efeitos das interações intermoleculares atrativas, gráficos foram utilizados correlacionando propriedades físico-químicas e o número de elétrons de substâncias conhecidas, embora seja fisicamente incompleto, o número de elétrons foi considerado a melhor alternativa para representar a polarizabilidade, pois o número de elétrons, apesar de não descrever a dinâmica da nuvem eletrônica, é mais adequado que somente as massas molares dos compostos (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Para evidenciar as correlações citadas, os gráficos foram apresentados na (figura 24), que relaciona os pontos de ebulição e entalpia de vaporização dos hidretos dos grupos IV-VII em função do número de elétrons.

Figura 24 - Pontos de ebulição e Entalpia de vaporização em função do nº de elétrons.



Fonte: Glazier, Marano e Eisen (2010), p. 1337.

Os gráficos demonstram não haver discrepâncias significativas entre os pontos de ebulição e as entalpias de vaporização. Também fica evidente que moléculas polares, apresentam pontos de ebulição maiores que o de moléculas apolares com o mesmo número de elétrons. Dados que ficam ainda mais evidentes quando dispostos na (tabela 9).

Tabela 9 - Propriedades dos quatro grupos de hidretos.

Hidretos	n° de elétrons	T <sub>ebulição</sub> (K)	$\mu$ (D)	$\alpha$ (Å <sup>3</sup> )
<b>Grupo IV</b>				
CH <sub>4</sub>	10	111,7	0	2,7
SiH <sub>4</sub>	18	161,2	0	5,0
GeH <sub>4</sub>	36	183,2	0	5,3
SnH <sub>4</sub>	54	221,4	0	6,9
<b>Grupo V</b>				
NH <sub>3</sub>	10	239,8	1,47	2,2
PH <sub>3</sub>	18	185,8	0,58	4,6
AsH <sub>3</sub>	36	210,7	0,20	5,3
SbH <sub>3</sub>	54	256,2	0,12	7,0
<b>Grupo VI</b>				
H <sub>2</sub> O	10	373,2	1,84	1,3
H <sub>2</sub> S	18	212,5	0,97	3,7
H <sub>2</sub> Se	36	231,9	0,24	4,6
H <sub>2</sub> Te	54	271,2	0,15	-
<b>Grupo VII</b>				
HF	10	292,7	1,82	0,75
HCl	18	188,3	1,08	2,7
HBr	36	206,2	0,82	3,6
HI	54	237,8	0,44	5,4

Fonte: Glazier, Marano e Eisen (2010), p. 1338.

Outro conceito discutido no artigo está relacionado com o equívoco de considerar que as interações dispersivas são mais fracas que as interações dipolo-dipolo. O exemplo dado, SnH<sub>4</sub> (apolar) tem um ponto de ebulição maior que as moléculas polares PH<sub>3</sub> e AsH<sub>3</sub>, devido às forças de dispersão mais fortes. Outra observação, é referente às propriedades dos hidretos do grupo VA da tabela periódica, PH<sub>3</sub>, AsH<sub>3</sub> e SbH<sub>3</sub>, embora a polaridade diminua, em função dos valores menores de eletronegatividade, o ponto de ebulição aumenta, confirmando que as forças de dispersão são dominantes.

É possível observar que as autoras apresentam o estudo da tendência dos pontos de ebulição, para introdução aos conceitos fundamentais das interações intermoleculares, como polaridade, polarizabilidade, pontos de ebulição e entalpias de vaporização. Além de evidenciar a grande contribuição das forças dispersivas na intensidade das interações, independentemente da polaridade das substâncias.

Algo que chama atenção neste artigo, é a utilização do parâmetro de polarizabilidade molecular para representar as interações intermoleculares, por estar presente nos termos de polarização e dispersão, que contribuem para a energia de

interação total, sobretudo, a ideia de substituir tal parâmetro pelo número de elétrons para facilitar a aprendizagem dos alunos e tentar deixar o mais próximo fisicamente, em relação a natureza elétrica da polarizabilidade.

Um trabalho publicado pelos autores Peckham e Mcnaught (2012), intitulado “*Ensinando Forças Intermoleculares a Alunos do Primeiro Ano de Graduação*”, deixa evidente desde o início, que a visão dada pelo artigo de Glazier, Marano e Eisen (2010), publicado na mesma revista, fornece uma excelente abordagem geral das interações intermoleculares, ao apresentar gráficos de pontos de ebulição versus o número de elétrons por moléculas de hidretos dos grupos IV-VII.

Entretanto, os autores consideram necessário ressaltar, que outras propriedades vistas nos cursos introdutórios de graduação em química, como viscosidade, tensão superficial, pontos de fusão entre outras, não apresentam a mesma correlação mostrada pelos pontos de ebulição e foram discutidas a seguir.

Peckham e McNaught (2012), de forma explícita, contrapõem os dados apresentados pelas autoras, no intuito de demonstrar que essas correlações não são tão simples, tais tendências são praticamente exclusivas para pontos de ebulição, mas não há o mesmo comportamento para outras propriedades físico-químicas.

De acordo com Peckham e Mcnaught (2012), os pontos de ebulição são uma medida razoavelmente boa da força das interações intermoleculares, mas fazem ponderações sobre a afirmação de Glazier, Marano e Eisen (2010), de que devido às forças de dispersão, os pontos de ebulição devem aumentar à medida que o número de elétrons por molécula aumenta. No entanto, os dados da (tabela 10) ilustram o comportamento anômalo dos pontos de ebulição de alguns tetrahalogenetos do grupo IV (que apenas exibem forças de dispersão).

Tabela 10 - Pontos de ebulição de alguns tetrahaletos do grupo IV.

Compound	Molar Mass/ (g mol <sup>-1</sup> )	Number of Electrons	Boiling Point/ °C
CCl <sub>4</sub>	153.82	74	+77
SiCl <sub>4</sub>	169.90	82	+58
CBr <sub>4</sub>	331.63	146	+190
SiBr <sub>4</sub>	347.70	154	+155

Fonte: Peckham e Mcnaught (2012), p. 955.

Como pode ser observada, a diferença de eletronegatividade entre os átomos na ligação Si-X, portanto, a polaridade dessa ligação é significativamente maior do que na ligação C-X. Apesar das ligações ligeiramente polares em  $CX_4$  e as ligações polares significativas em  $SiX_4$ , ambas as moléculas são globalmente apolares devido à sua simetria. Quando vistas à distância, as regiões externas, ou “superfície”, das moléculas  $CX_4$  e  $SiX_4$  têm um leve excesso de carga negativa. A repulsão eletrostática suficientemente grande pode reduzir a intensidade das forças atrativas e diminuir o ponto de ebulição, é um dos raros casos de comportamento anômalo para tal propriedade (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

A ênfase dada pelos autores sobre o fato de serem incomuns anomalias relacionadas à tendência dos pontos de ebulição em grupos, corrobora com os apontamentos do primeiro trabalho, Glazier, Marano e Eisen (2010), que apontavam os pontos de ebulição, como sendo uma boa medida da magnitude das interações intermoleculares.

Outras propriedades como pontos de fusão, viscosidade e tensão superficial, que são frequentemente abordadas em livros didáticos de química geral, foram discutidas pelos autores, para demonstrar o que eles chamam de anomalias, com o intuito de evidenciar, que essas propriedades físicas não exibem necessariamente a mesma correlação com as interações intermoleculares, como é geralmente demonstrado pelos pontos de ebulição.

Segundo Peckham e Mcnaught (2012), para cada uma das propriedades físicas mencionadas acima, é sempre possível selecionar rigorosamente alguns compostos e criar tabelas com os dados relevantes, para ilustrar uma correlação entre essa propriedade e as interações intermoleculares correspondentes. No entanto, isso pode provocar uma interpretação equivocada de ter as interações como influência exclusiva a ser considerada.

Um exemplo explorado pelos autores para demonstrar tal argumento é apresentado na Tabela 11, onde há uma correlação tanto dos pontos de ebulição, quanto de fusão, com as forças intermoleculares e consequentes aumentos de tais parâmetros com o nº de elétrons por molécula, tendência encontrada na tabela.



Tabela 11 - Pontos de fusão e ebulição de alguns silanos.

Compound	Molar Mass/ (g mol <sup>-1</sup> )	Number of Electrons	Melting Point/°C	Boiling Point/°C
Silane, SiH <sub>4</sub>	32.12	18	-185	-112
Disilane, Si <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	62.22	34	-129	-15
Trisilane, Si <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	92.32	60	-117	+53

Fonte: Peckham e Mcnaught (2012), p. 956.

Essa interpretação intuitiva, criada por esse exemplo, é convenientemente dissipada por dados semelhantes de outros compostos. Como mostra a (tabela 12), para álcoois, o aumento nos pontos de ebulição, correlaciona-se perfeitamente com o aumento esperado nas interações. Porém, contrariando as expectativas, os pontos de fusão mostram exatamente a tendência oposta.

Tabela 12 - Pontos de fusão e ebulição de alguns álcoois.

Compound	Molar Mass/ (g mol <sup>-1</sup> )	Number of Electrons	Melting Point/°C	Boiling Point/°C
Methanol, CH <sub>3</sub> OH	32.04	18	-98	+65
Ethanol, C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	46.07	26	-114	+78
Propan-1-ol, C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	60.10	34	-124	+97

Fonte: Peckham e Mcnaught (2012), p. 956.

Uma situação semelhante surge para a viscosidade, considerando os isômeros do butanol. Como na (tabela 13), esses isômeros têm a mesma massa molar, número de elétrons e uma ligação de hidrogênio. No entanto, suas forças de dispersão são afetadas por sua forma.

Tabela 13 - Pontos de ebulição e viscosidade de alguns isômeros do Butanol.

Compound	Molar Mass/ (g mol <sup>-1</sup> )	Number of Electrons	Boiling Point/ °C	Viscosity/ (mPa s) (at 30 °C)
Butan-1-ol	74.12	46	+117.7	2.271
2-Methylpropan-1-ol	74.12	46	+107.9	2.842
2-Methylpropan-2-ol	74.12	46	+82.4	3.378

Fonte: Peckham e Mcnaught (2012), p. 956.

O arranjo dos elétrons é um dos fatores que exercem influência na polarizabilidade molecular e conseqüentemente nas interações entre as moléculas. Não é diferente para as forças dispersivas, observa-se que as mesmas, são afetadas pela disposição ou forma das moléculas, a simetria das suas estruturas são fundamentais na intensidade de tais interações.

Moléculas com estruturas “longas e finas”, como, por exemplo, o butan-1-ol, possuem maior área superficial de contato, por conseqüência, têm maiores forças de dispersão do que moléculas mais esféricas ou “globulares” de tamanho similar. Dessa maneira, espera-se que as interações intermoleculares nestas moléculas, diminuam quanto mais esféricas (menor área de contato) se tornam os isômeros. Uma molécula “longa e fina”, como o butan-1-ol, tem forças dispersivas mais fortes do que o seu isômero mais “globular”, o 2-metilpropan-1-ol, e seu isômero ainda mais “globular”, 2-metilpropan-2-ol, por conseguinte, maior ponto de ebulição e menor viscosidade (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

A organização dos átomos nas moléculas e o conseqüente formato dessas moléculas, são características essenciais a serem consideradas para interpretar a magnitude das forças dispersivas e conseqüente forças intermoleculares, principalmente em moléculas com os mesmos números de elétrons e átomos presentes na composição.

Outro exemplo que os autores destacam, são as tendências opostas das tensões superficiais de uma série homóloga de ésteres mostrada na (tabela 14), enquanto os pontos de ebulição aumentam quanto maior o número de elétrons e força das interações.

Tabela 14 - Pontos de ebulição e tensões superficiais de ésteres homólogos.

Compound	Molar Mass/ (g mol <sup>-1</sup> )	Number of Electrons	Boiling Point/ °C	Surface Tension/ (mN m <sup>-1</sup> ) (at 20 °C)
Methyl chloroacetate	108.52	56	+130	35.3
Ethyl chloroacetate	122.55	64	+143	31.8
Propyl chloroacetate	136.58	72	+161	30.7
Butyl chloroacetate	150.60	80	+183	30.2

Fonte: Peckham e Mcnaught (2012), p. 956.

Na etapa final das discussões relacionadas às tabelas apresentadas, os autores consideram, que há uma enorme gama de possibilidades para apoiar ou contrapor com dados, correlações entre alguma propriedade física e as correspondentes interações intermoleculares. Portanto, é interessante que seja bem planejado fornecer aos alunos, uma série de exemplos criteriosamente selecionados para propriedades físicas, que não sejam pontos de ebulição e entalpia de vaporização.

A análise inicial destes dois trabalhos, manifesta a importância das propriedades físico-químicas para a compreensão das interações intermoleculares, não é por acaso que muitas correlações são apresentadas em livros didáticos visando explorar as consequências das interações.

Um dos conceitos fundamentais que emergiu da análise dos artigos selecionados, é considerar a entalpia de vaporização como uma medida direta da força das interações intermoleculares, logo, após conversões com base em cálculos da termodinâmica, é possível concluir que o ponto de ebulição também apresenta relação similar.

É fundamental a utilização em tais correlações entre interações e parâmetros moleculares, que representem a energia de interação intermolecular total, consigam agregar aspectos relacionados à natureza elétrica e a estrutura molecular e essas características são reunidas pela polarizabilidade, que configura a dinâmica da nuvem eletrônica e descreve as forças dispersivas.

Nestes primeiros trabalhos, aqui apresentados (Glazier, Marano e Eisen (2010), Peckham e Mcnaught (2012)), fica evidente, que para o entendimento deste parâmetro e das consequências das interações, é necessária uma boa noção de geometria e polaridade molecular, uma vez que o domínio de tais conceitos facilita a compreensão de anomalias de comportamento das propriedades em função das interações entre as moléculas.

Pensando em facilitar o entendimento da polarizabilidade, que em muitos materiais didáticos é preterido equivocadamente pelas massas molares, para explicar a tendência de pontos de ebulição de séries homólogas de compostos químicos. Uma alternativa sugerida nas publicações é a de utilizar o número de elétrons como forma de representar a polarizabilidade, por conseguinte, as forças intermoleculares.

A indicação parte do pressuposto que o número de elétrons é fisicamente mais próximo dos aspectos referentes à estrutura e natureza elétrica das moléculas. Mesmo que houvesse uma correlação linear entre o número de elétrons e a polarizabilidade, porém, o fato de apenas contabilizar os elétrons, não leva em conta como eles estão organizados, tão pouco quão firmemente eles são mantidos.

De forma rápida, por meio de tabelas que correlacionam as forças intermoleculares, representadas pelo número de elétrons e diferentes propriedades físicas, como ponto de fusão, viscosidade e tensão superficial, é possível perceber que existem muitas anomalias, que desabona o uso exclusivo de tendências das consequências das interações pelas propriedades. Embora o ponto de fusão, a viscosidade, a tensão superficial, sejam afetados pelas interações intermoleculares, essas propriedades físicas não exibem necessariamente a mesma correlação nítida com as interações, como é geralmente demonstrado pelos pontos de ebulição.

Em todas as propriedades abordadas (pontos de fusão e ebulição, viscosidade e tensão superficial) fica evidente a importância de conhecer a estrutura molecular e as propriedades moleculares relacionadas a natureza elétrica das substâncias, principalmente para explicar as tendências e anomalias do comportamento dos materiais em função das propriedades.

Outra publicação que é abordada algumas questões relacionadas às propriedades físico-químicas, como consequências das interações intermoleculares, é a de Jasien (2008), em que há uma discussão sobre a importância relativa de diferentes forças intermoleculares.

O primeiro enfoque dado pelo autor sobre as propriedades físico-químicas, traz apontamentos sobre equívocos cometidos pelos estudantes em relação à magnitude das interações. De acordo com Jasien (2008), muitos graduandos consideram, que substâncias com ligações de Hidrogênio terão as interações intermoleculares mais fortes, portanto, os pontos de ebulição mais altos.

Tal concepção, tem a sua origem nos constantes gráficos de pontos de ebulição para os compostos  $HnX$ , onde  $X$  é um elemento do grupo 15-17. Mesmo as moléculas maiores do grupo, têm ponto de ebulição mais baixo que as menores, devido às ligações de hidrogênio nas últimas. Além disso, os livros didáticos reforçam inadvertidamente essa ideia, através de tabelas que mostram as energias associadas a vários tipos de interações intermoleculares.

A partir desses gráficos e tabelas, pode-se inferir ser impossível para uma molécula apolar, com apenas forças dispersivas, apresentar ponto de ebulição maior que o de uma molécula polar com ligações de hidrogênio.

Nesse contexto, Jasien (2008) descreve um erro muito comum entre os estudantes, atribuir pontos de ebulição mais altos para compostos químicos que apresentem ligações de hidrogênio, sem considerar outros aspectos. Muitos deles sugeriram que o composto  $C_{50}H_{102}$  apresenta ponto de ebulição menor que o da  $H_2O$ , justificando que ele é apolar e exibe apenas interações dispersivas tidas como fracas por eles.

Jasien (2008), também levanta a questão de qual a propriedade molecular adequada para representar as interações dispersivas e lembra que, sobretudo em compostos apolares, sempre foi recorrente correlacionar tais interações com as respectivas massas molares. Mas ressalta que recentemente, muitos livros didáticos estão a substituir as massas por polarizabilidades moleculares, apropriadamente, segundo o autor.

Refratividade molar, área superficial, volume e número de elétrons são outros parâmetros utilizados para descrever a relação de tamanho molecular e pontos de ebulição.

Um modelo apresentado pelo autor nesse mesmo artigo, defende o ponto de ebulição como a melhor descrição das interações intermoleculares e tem como proposta calculá-lo considerando todas as contribuições de cada tipo de interação.

Essa proposição via equação, enfatiza a forte correlação entre a propriedade física ponto de ebulição e as interações, além de apresentar as forças intermoleculares de maneira unificada. A equação é dada abaixo, sendo o primeiro termo representando as interações dispersivas (área superficial), segundo termo representando as interações dipolares (momento de dipolo) e o terceiro termo é atribuído à contribuição das ligações de hidrogênio. De acordo Jasien (2008), com a descrição das forças intermoleculares como sendo compostas por termos dispersivo, dipolo-dipolo e ligação de hidrogênio, apenas essas três quantidades foram usadas em uma análise de regressão linear múltipla (MLR). Assim, a equação resultante do MLR terá a seguinte forma:

$$T_b = \left(1.1 \frac{K}{\text{Å}^2}\right) SA + \left(21 \frac{K}{D}\right) \mu + (25 K)BH + 155 K$$

Nesta equação, SA é a área superficial molecular em  $\text{Å}^2$ ,  $\mu$  é o momento de dipolo elétrico permanente em Debye (D) e BH é uma variável indicadora adimensional para ligações de hidrogênio.

Apesar de a equação demonstrar a influência de cada tipo de interação na determinação do ponto de ebulição, o destaque é dado às interações de dispersão representadas pela área superficial (obtida via modelo CPK (Corey-Pauling-Koltun), que usa esferas de preenchimento de espaço e permite visualizar a forma efetiva e as dimensões relativas das moléculas), como principal componente do potencial de interação, independentemente da polaridade dos compostos (tabela 15).

Tabela 15 - Áreas superficiais com pontos de ebulição para alguns álcoois e alcanos.

Álcool	CPK Área/Å <sup>2</sup>	T <sub>eb</sub> /K	Hidrocarboneto de comparação	CPK Área/Å <sup>2</sup>	T <sub>eb</sub> /K
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	82.0	351.5	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	157.3	341.9
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	103.9	370.3	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	179.1	371.5
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH	125.8	390.6	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	201.0	398.7
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> OH	147.6	411	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	222.9	423.8
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> OH	169.5	430	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	246	447.2
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> OH	191.4	448	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	267.88	468
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> OH	213.3	468	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	289.75	489
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> OH	235.1	485	-	-	-

Fonte: Jasien (2008), p. 1224.

O modelo foi desenvolvido com o objetivo de obter uma estimativa dos efeitos relativos à dispersão, interações dipolo-dipolo e ligações de hidrogênio nos pontos de ebulição de uma série de compostos orgânicos de cadeia linear.

De acordo com Jasien (2008), o modelo pode ajudar os estudantes a entender integralmente a aditividade das interações intermoleculares, além de constatarem que os efeitos da dispersão aumentam com o tamanho molecular como é possível observar na tabela.

Jasien (2008) explica que o modelo usado no trabalho mostra que a equação faz um bom trabalho de previsão dos pontos de ebulição relativos, não os valores absolutos. No entanto, o objetivo foi simplesmente obter uma visão sobre a importância relativa dos três termos na determinação dos pontos de ebulição das moléculas estudadas.

A partir das publicações selecionadas, outra propriedade físico-química abordada e diretamente relacionada com as interações intermoleculares é a solubilidade, fenômeno em que uma substância se dissolve em outra numa determinada quantidade a uma dada temperatura.

A definição de solubilidade é dada como a composição analítica de uma solução saturada, expressa em termos da proporção de um soluto designado em um solvente designado, é a solubilidade desse soluto. A solubilidade pode ser expressa como concentração, molalidade, fração molar, razão molar, etc. (IUPAC, 2014).

De acordo com Battino e Letcher (2001) o fenômeno da solubilidade de um composto químico em outro, esteve na vanguarda da química e manteve o fascínio dos cientistas e do público leigo por eras. Esse trecho demonstra tal fascínio:

Como é que uma substância pode "desaparecer" ou dissolver-se em outra, um gás ou um sólido ou um líquido em um solvente líquido? Parece haver limites estranhos para essa solubilidade: dependendo da solução, alterações na temperatura podem resultar em separação de fases, tal fenômeno tem aparências de mágica.

Uma das regras usadas no contexto da aprendizagem do conceito de solubilidade e citado pelos autores, como correto e simplificador, é o de que "semelhante dissolve semelhante". Por "semelhante" entende-se as semelhanças entre estrutura e polaridade das moléculas, resumidamente, solutos apolares se dissolvem em solventes apolares e solutos polares em solventes polares.

Pensando no aspecto de aprendizagem conceitual, tal regra é uma forma equivocada de interpretar o fenômeno solubilidade somente com base no parâmetro polaridade, basta constatar inúmeros exemplos que divergem desta ideia. Por exemplo, o oxigênio molecular ( $O_2$ ) dissolvido em água, embora em baixa concentração, de extrema importância para a vida em ecossistemas aquáticos, envolve substâncias com polaridades diferentes (JUNQUEIRA; MAXIMIANO, 2020).

O trabalho de Battino e Letcher (2001) trata de uma introdução ao entendimento de solubilidade e foi selecionado por apresentar na estrutura do texto, um espaço dedicado a relação da solubilidade de líquidos em termos de interações intermoleculares.

Segundo os autores, quando há a mistura entre dois líquidos, ambos são dispersos um no outro. Tal processo pode ser dividido em três etapas:

- (i) a dispersão das moléculas do líquido A (efeito endotérmico);
- (ii) a dispersão das moléculas do líquido B (efeito endotérmico); e
- (iii) a associação das moléculas A e B (exotérmica).

Se o último estágio, representado pelo item (iii) é o processo dominante e a energia das interações  $A - B > A - A$  ou  $B - B$ , então o processo geral é exotérmico, há um desvio negativo em relação à Lei de Raoult e a mistura ocorrerá. Isso é o que ocorre, por exemplo, no sistema acetona e clorofórmio. No entanto, se a energia da interação  $A-A$  ou  $B-B$  for muito maior que  $A-B$ , podemos esperar um grande desvio positivo da lei de Raoult e, conseqüentemente, separação de fases (limitada miscibilidade) (BATTINO; LETCHER, 2001).

Compreendendo as misturas, sabe-se que as substâncias líquidas frequentemente se misturam para formar apenas uma fase, mesmo em concentrações muito baixas para algumas misturas. A separação de fases ocorre quando as forças intermoleculares entre as moléculas de um líquido são muito mais fortes que as forças intermoleculares entre esse líquido e os outros líquidos no sistema.

Para sólidos dissolvidos em líquidos Battino e Letcher (2001) destacam que em todos os processos de dissolução, o soluto é disperso por todo o solvente. Para sólidos em líquidos, isso envolve dois estágios:

1. A separação de moléculas de soluto (ou íons no caso de material iônico) umas das outras; e



2. A associação de moléculas de soluto separadas (ou íons) e as moléculas de solvente.

Tal entendimento da solubilidade de sólidos em líquidos, assim como os líquidos que se dissolvem em líquidos, a solubilidade depende da natureza relativa das interações moleculares no soluto e no solvente. Porém, de maneira diferente dos líquidos, a solubilidade de um sólido depende consideravelmente da magnitude da entalpia de fusão e do ponto de fusão do soluto.

Apesar de mostrar o caráter fundamental da compreensão das forças intermoleculares, principalmente no que se refere à magnitude entre os diferentes tipos de interações, a classificação utiliza os dados termodinâmicos para interpretar os processos, em que os sistemas reais podem ser positivos ou negativos, sendo a magnitude útil como um indicador de "não idealidade".

Outra publicação selecionada que aborda o tema, tem como proposta discutir a solubilidade de compostos orgânicos em termos de suas propriedades, como tipo de ligações químicas, estruturas moleculares, polaridade e interações intermoleculares. É importante considerar que a solubilidade é também uma propriedade molecular física, que exerce papel fundamental na dinâmica e comportamento das substâncias químicas, em especial dos compostos orgânicos.

Segundo Martins, Lopes e de Andrade (2013) a solubilidade de uma substância orgânica está extremamente relacionada com a estrutura molecular, sobretudo com a polaridade das ligações e da espécie química que é representada por seu momento de dipolo.

Em relação aos processos de solubilização, Martins, Lopes e de Andrade (2013), abordam de forma apropriada em diversos momentos do trabalho, embora, inicialmente, há um pequeno trecho que faz referência ao uso da regra empírica já citada no âmbito desse tema.

Geralmente, os compostos apolares ou fracamente polares são solúveis em solventes apolares ou de baixa polaridade, enquanto que compostos de alta polaridade são solúveis em solventes também polares, o que está de acordo com a regra empírica de grande utilidade: "polar dissolve polar, apolar dissolve apolar" ou "o semelhante dissolve o semelhante".

Exatamente como se destaca, a regra é de grande utilidade, mas é fundamental reconhecer que ela pode prejudicar na interpretação submicroscópica de

sistemas mais complexos ou induzir o estudante a generalização de tal regra para outros sistemas moleculares (JUNQUEIRA; MAXIMIANO, 2020).

Um exemplo de atividade de experimentação em química que enfatiza estes aspectos, é a determinação do teor de álcool em uma amostra de gasolina. Há interação entre as moléculas de etanol anidro e gasolina, em seguida após a adição de uma quantidade conhecida de solução salina, ocorrem interações mais intensas entre as moléculas de etanol, água e os íons presentes, resultando em uma única fase diferente em termos de polaridade (separada) da fase constituída somente por moléculas de gasolina.

Apesar de a maior parte dos livros não explorarem as interações intermoleculares envolvidas em tal exemplo, a discussão muitas vezes fica restrita, apenas a separação de fases e classificação de misturas quanto à homogeneidade. No entanto, as magnitudes entre os diferentes tipos de forças intermoleculares, são fundamentais para o pleno entendimento da dinâmica entre as substâncias do sistema (etanol, solução salina e gasolina).

Os autores utilizam outros compostos orgânicos para desenvolver esse mesmo raciocínio, lembram que etano,  $C_2H_6$  e tetracloreto de carbono,  $CCl_4$ , espécies apolares, são comumente substâncias insolúveis em água ou demais solventes polares. As explicações dadas também reforçam a correlação existente entre a solubilidade e a magnitude das interações entre as moléculas envolvidas no sistema (MARTINS; LOPES; De ANDRADE, 2013).

As moléculas de água estão unidas por interações dipolo-dipolo por serem polares e as novas interações atrativas que seriam capazes de se estabelecer entre as moléculas de água e as moléculas de etano ou de tetracloreto de carbono são fracas, não compensando do ponto de vista energético, o processo de dissolução. Em contrapartida, o etanol,  $C_2H_5OH$ , sendo polar, é muito solúvel em água, devido às interações que ocorrem entre moléculas de água e etanol, que são da mesma ordem de grandeza das interações atrativas entre as moléculas de etanol e entre as moléculas de água (MARTINS; LOPES; De ANDRADE, 2013).

Os autores evidenciam que a solubilidade é muito útil para se confirmar a polaridade relativa de compostos orgânicos, identificar o grupo funcional e determinar os solventes adequados para recristalizações, reações químicas, análises espectrais e cromatográficas.

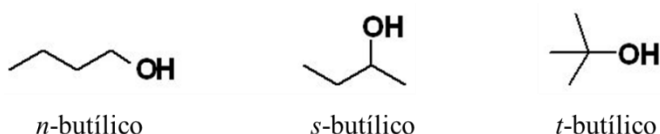
Algumas características dos compostos orgânicos são fundamentais para o entendimento da solubilidade, na maior parte dos casos, a polaridade da molécula é dada pelo seu respectivo momento de dipolo, que é dependente da soma vetorial dos momentos referentes às ligações polares individuais, também em função da disposição espacial dos átomos e da presença de elétrons não ligantes.

O texto também traz uma breve discussão da solubilidade dos diferentes compostos orgânicos, sintetizando os aspectos mais relevantes que foram apresentados nos parágrafos seguintes, tendo sempre como enfoque, os parâmetros moleculares e as interações intermoleculares.

No caso dos hidrocarbonetos, as forças dispersivas são tidas como responsáveis por manter as moléculas unidas e são mais intensas proporcionalmente ao aumento de tamanho das moléculas. O fato de serem apolares faz com que alcanos e cicloalcanos sejam pouco solúveis em solventes polares como a água (MARTINS; LOPES; De ANDRADE, 2013).

Segundo os autores, os álcoois com até três átomos de carbono são infinitamente solúveis em água e essa solubilidade tende a diminuir com o aumento da cadeia carbônica, ocasionada pelo crescimento da parte hidrofóbica das moléculas. No entanto, a solubilidade de alguns álcoois é dependente do arranjo espacial das moléculas, a posição da hidroxila em diferentes álcoois, pode provocar variações nas forças intermoleculares e, conseqüentemente, influenciar nas propriedades físicas.

Um exemplo disso é abordado a partir das estruturas do álcool *n*-butílico e os seus isômeros *s*-butílico e *t*-butílico, que apresentam as seguintes solubilidades em água: 7,9g/100g de água, 12,5g/100g de água e completamente miscível. A posição do grupo -OH interfere no caráter hidrofóbico da molécula de álcool, sendo que na molécula mais esférica (*t*-butílico) predomina as interações mais intensas (MARTINS; LOPES; DE ANDRADE, 2013).

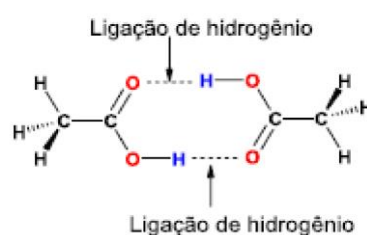


Em relação à solubilidade dos ácidos carboxílicos, têm-se valores altos para compostos de cadeia alquílica curta, solúveis em água em qualquer proporção para

ácidos com até quatro átomos de carbono. Entretanto, a solubilidade diminui com o aumento do tamanho das cadeias dos ácidos.

Um fato evidenciado pelos autores, é o de que ácidos carboxílicos apresentam solubilidade relativa em solventes imiscíveis em água, como clorofórmio, pois são dissolvidos como dímeros formados por ligações de hidrogênio como pode ser visto na (figura 25).

Figura 25 - Dímeros formados entre ácidos carboxílicos.



Fonte: Martins, Lopes e De Andrade (2013), p. 1252.

As ligações de hidrogênio formadas entre as moléculas de ácido permitem que as outras partes das moléculas tenham interações dispersivas com as moléculas de solventes apolares.

Uma última consideração relevante sobre a solubilidade de compostos orgânicos presente no texto, está relacionada as vitaminas e a influência das suas respectivas estruturas no processo de solubilização. As vitaminas B e C são solúveis em água (hidrossolúveis) e as vitaminas A, D, E e K são solúveis em tecidos adiposos (lipossolúveis). O fato das vitaminas B e C serem solúveis em água, faz com que não sejam armazenadas no organismo, portanto, devem ser ingeridas diariamente. Em contrapartida, as vitaminas lipossolúveis (A, D, E e K) são armazenadas nos tecidos, ficam presentes no organismo mesmo após um longo período sem a ingestão dessas vitaminas (MARTINS; LOPES; DE ANDRADE, 2013).

As diferenças estruturais entre as vitaminas A e C são apresentadas para justificar o fato de serem classificadas como lipossolúveis e hidrossolúveis, respectivamente. A vitamina A (retinol) é um álcool de cadeia alquílica longa e apenas um grupo hidroxila, o retinol pode ser considerado como fracamente polar. Já a vitamina C é caracterizada como polar devido a menor estrutura e mais grupos hidroxilas. A presença de tais grupos proporciona ligações de hidrogênio com



sugerir qual composto terá a temperatura de ebulição maior e esse tipo de análise torna-se persistente.

Uma publicação de Fowkes (1963), selecionada, por também abordar a relação entre propriedades físico-químicas e as interações entre as moléculas, defende que a tensão na superfície de líquidos, é uma medida direta das forças intermoleculares, além de ser considerada uma ferramenta importante para determinar a magnitude de tais interações.

Conforme o autor, para hidrocarbonetos saturados, a tensão superficial mede apenas as forças dispersivas, mas para líquidos complexos, como a água, a tensão superficial é a soma das contribuições das interações dipolares, das forças de ligação de hidrogênio e de dispersão.

A tensão nas camadas superficiais é resultante das forças atrativas da estrutura molecular do líquido pela camada superficial. Moléculas são direcionadas para a estrutura do líquido a partir da camada superficial e o aumento consequente na separação intermolecular, resulta em uma tensão bidimensional. Na interface entre dois líquidos, as camadas adjacentes de diferentes moléculas, estão em campos de força muito diferentes daqueles existentes na estrutura dos líquidos. Essas duas camadas têm diferentes distâncias intermoleculares, diferentes pressões, e diferentes potenciais químicos a partir da estrutura, e pode bem ser considerado como fases separadas (FOWKES, 1963).

Considerando que as moléculas não estão isoladas, há diversas propriedades físico-químicas que podem ser correlacionadas com as interações intermoleculares, fica evidente que as mais comuns de serem exploradas nos materiais didáticos, são àquelas que de alguma forma, apresentam um comportamento que pode ser previsto em função das suas características estruturais e físicas.

Um ponto interessante de observar, é que apesar de tratarmos de uma publicação da década de 60, o autor destaca que a tensão superficial depende da contribuição de diferentes tipos de interações, aspecto fundamental para a compreensão do tema, o reconhecimento da existência de distintas interações em um mesmo sistema molecular (FOWKES, 1963).

Uma publicação da revista *Educación Química*, trata da relação entre a estrutura e algumas das propriedades dos polímeros, como a temperatura de fusão,

temperatura de transição vítrea, a cristalinidade e as propriedades mecânicas, sobretudo a importância das forças intermoleculares em tais propriedades.

Segundo Méndez-Bautista e Coreño-Alonso (2010), os fatores que principalmente contribuem à cristalinidade de um polímero, são as magnitudes das forças intermoleculares e estruturas que permitem um arranjo regular. Um exemplo em que o efeito é notável, da influência das interações intermoleculares na formação de cristais, ocorre no Nylon 6,6, cujas cadeias se encontram fortemente unidas por forças de van der Waals e ligações de hidrogênio.

De acordo com os autores, as regiões cristalinas em polímeros conferem rigidez e resistência aos polímeros e evidenciam que a cristalinidade apresenta consequências notadas nas propriedades: diminuição da solubilidade, permeabilidade a gases e dispersão da luz aumentada.

A força das interações intermoleculares entre grupos laterais de cadeias carbônicas, interfere na facilidade de movimento segmental, logo, na sua temperatura de transição vítrea ( $T_g$ ), definida por Méndez-Bautista e Coreño-Alonso (2010) como:

A temperatura de transição vítrea ou  $T_g$  é um intervalo curto de temperaturas nas quais os materiais plásticos, quando resfriados, eles passam de flexíveis a rígidos. Essa transição está relacionada com mobilidade e disponibilidade do segmento de cadeia de certo volume (volume livre) para o referido segmento se mover. Esses movimentos podem ser visualizados como rotações coordenadas nas extremidades dos segmentos que abrangem aproximadamente 5 a 20 átomos.

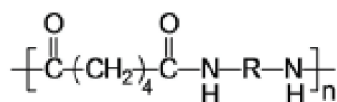
Os parâmetros que determinam a  $T_g$  são aqueles que mudam a facilidade de movimento dos segmentos da cadeia polimérica, os mais importantes a rigidez ou flexibilidade da cadeia e a intensidade das forças intermoleculares.

Dos artigos selecionados, a propriedade físico-química abordada, por ser considerada importante para demonstrar a forte relação das interações entre as moléculas e propriedades foi a temperatura de fusão, isso não é diferente quando se trata de polímeros.

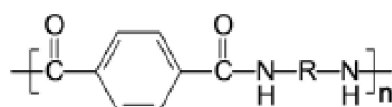
Os autores apresentam exemplos em que se pode observar que o aumento da distância entre os grupos amida, devido a um maior número de grupos espaçadores ( $-\text{CH}_2-$ ) em R, em séries de tereftalamidas e adipamidas, proporciona uma redução das ligações de hidrogênio que reflete na diminuição das temperaturas de fusão ( $T_f$ ) como pode ser visto na (figura 27).

Figura 27 - Efeito da rigidez da cadeia em  $T_f$ .

Adipamidas (11)	$T_f$ (°C)	Tereftalamidas (12)	$T_f$ (°C)
R = 4 CH <sub>2</sub>	295	R = 4 CH <sub>2</sub>	455
R = 5 CH <sub>2</sub>	230	R = 5 CH <sub>2</sub>	399
R = 7 CH <sub>2</sub>	220	R = 6 CH <sub>2</sub>	341



(11) Adipamidas



(12) Tereftalamida

Fonte: Méndez-Bautista e Coreño-Alonso (2010), p. 297.

É importante lembrar que um dos equívocos geralmente cometidos pelos estudantes e já discutidos neste trabalho, é o de considerar que o aumento da massa molar, promove valores mais altos de pontos de fusão. Esse exemplo, mesmo que para polímeros, mostra um processo inverso de tal tendência, o aumento das cadeias carbônicas, diminui os pontos de fusão por influenciarem na separação e consequente intensidade das ligações de hidrogênio na composição dos polímeros.

Outras características que também são fundamentais para as inúmeras aplicações dos polímeros, são as propriedades mecânicas, os elastômeros, por exemplo, são flexíveis sendo facilmente deformáveis elasticamente e apresentam reversibilidade em alongamentos com esforços moderadamente ínfimos. Tais aspectos são resultados de interações intermoleculares mais fracas, além de outras características. Os plásticos flexíveis têm baixa resistência à tração e um alongamento médio devido a interações intermoleculares mais altas, o que aumenta suas propriedades mecânicas, esses materiais podem ser semicristalinos, como PE, Nylon e PP, ou amorfos, como PC, PS e PMMA (MÉNDEZ-BAUTISTA; COREÑO-ALONSO, 2010).



Este artigo da revista *Educación Química*, mostra a forte relação existente entre algumas propriedades dos polímeros e suas respectivas estruturas moleculares, por conseguinte, as interações intermoleculares.

De maneira geral, o estudo das interações intermoleculares, tem um curto espaço na disciplina de química geral, mas é evidente que esse tema transpassa por vários conteúdos da graduação em química. Na química orgânica não é diferente, a compreensão das interações intermoleculares é fundamental na abordagem das propriedades dos compostos orgânicos e incluindo os polímeros, sobretudo no processo de ensino.

Finalmente, do ponto de vista conceitual, é importante destacar que as propriedades físico-químicas têm papel fundamental quando relacionadas às estruturas moleculares, na compreensão das forças intermoleculares. A entalpia de vaporização é a propriedade que apresenta a melhor correlação com as interações e mediante o uso de equações de termodinâmica, pode ser substituída pelo ponto de ebulição, facilitando a abordagem com estudantes de graduação.

O entendimento dos pontos de ebulição das substâncias químicas exige a retomada dos conceitos de polaridade e geometria molecular, além de muitos trabalhos associarem tal propriedade física às interações dispersivas, o que demanda a compreensão de outros parâmetros moleculares, em especial a polarizabilidade, que em uma das publicações, foi representada pela área superficial das moléculas estudadas.

Outras propriedades são relacionadas às interações com menor frequência em livros didáticos, pois não apresentam as chamadas tendências a um comportamento uniforme em relação a uma dada propriedade física, por exemplo, para hidrocarbonetos lineares, o aumento do ponto de ebulição com o aumento da massa molar.

As principais propriedades que foram abordadas e apontaram comportamentos diferentes do esperado, em algumas publicações identificadas como anomalias, foram os pontos de fusão, viscosidade e tensão superficial. Tais desvios, na maioria das vezes, foram explicados pelas características de natureza elétrica e estrutural.

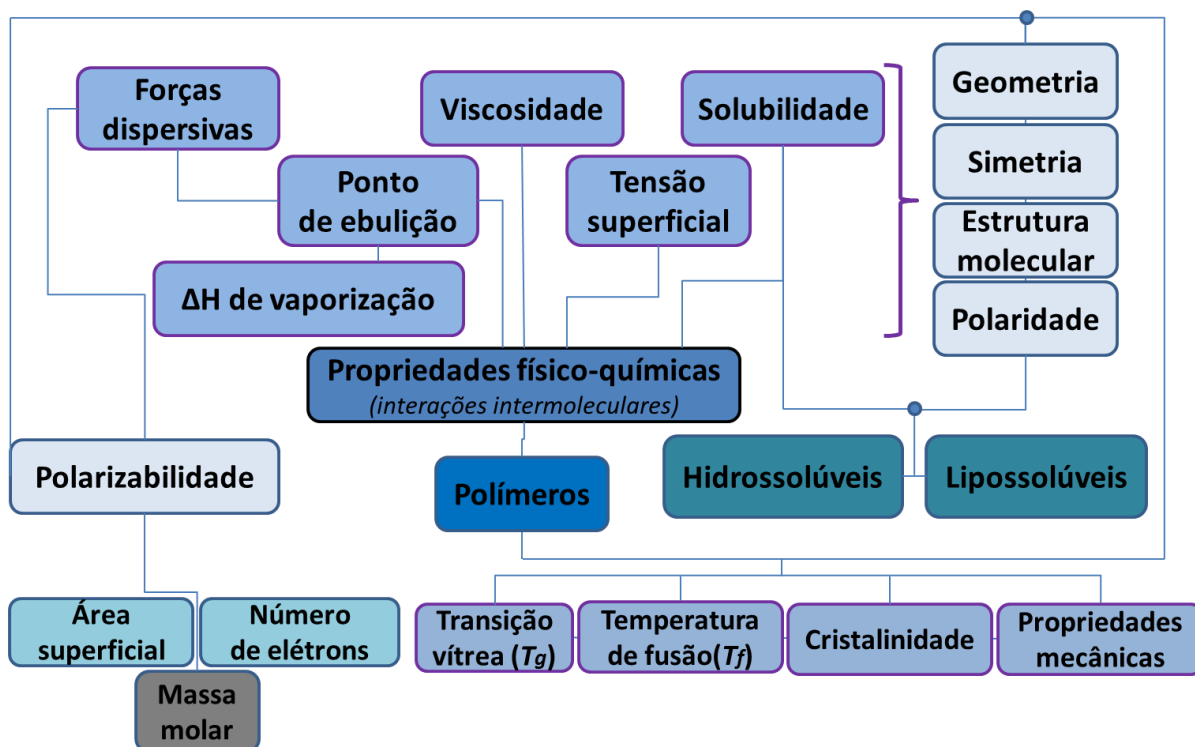
A solubilidade dos compostos químicos também foi investigada e apresenta relações estreitas com as forças intermoleculares, sobretudo os efeitos das diferentes

polaridades e estruturas moleculares, nas interações soluto-soluto, solvente-solvente e soluto-solvente. Para compostos orgânicos, há uma nomenclatura que facilita o entendimento dessa propriedade físico-química, as substâncias que são denominadas hidrossolúveis ou lipossolúveis de acordo com sua solubilidade.

E por fim, várias propriedades dos polímeros, que são integralmente compreendidas e possíveis de serem manipuladas, quando correlacionadas às interações intermoleculares, como a flexibilidade, solubilidade, resistência, permeabilidade, etc.

A (figura 28) representa o esquema que resume os conceitos fundamentais, parâmetros e as suas relações acerca das propriedades físico-químicas na perspectiva das interações intermoleculares.

Figura 28 - Conceitos fundamentais sobre as propriedades físico-químicas com base na pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

Mesmo que uma síntese foi realizada, torna-se importante explicitar o esquema que elenca os principais conceitos das publicações analisadas, pois é uma maneira de pré-definir a organização do mapa conceitual, que estará fundamentado nos conteúdos conceituais pertinentes sobre propriedades físico-químicas.

Vale considerar, que as propriedades físico-químicas explicadas pelas interações intermoleculares são extensas e distintas, mas algumas delas podem ser abordadas para melhorar a compreensão de tais interações. A entalpia de vaporização, por exemplo, é caracterizada por apresentar uma ótima correlação com as interações intermoleculares, por conseguinte, os pontos de ebulição das substâncias têm comportamento similar.

Essa similaridade não se repete com as outras propriedades físico-químicas como viscosidade, tensão superficial e solubilidade e isso deve ser explorado no ensino de química para evitar equívocos por parte dos estudantes. Todas essas propriedades até aqui citadas demandam do conhecimento de parâmetros como geometria, polaridade, simetria e fundamentalmente a estrutura molecular.

Um dos aspectos mais comuns é o estabelecimento das correlações entre pontos de ebulição e parâmetros que representem as forças intermoleculares, em especial a polarizabilidade devido ao caráter predominante na maioria dos sistemas moleculares. Polarizabilidade que muitas vezes é associada à número de elétrons, área superficial ou até massa molar para facilitar o entendimento da sua natureza elétrica complexa.

Como as propriedades estão diretamente ligadas a materiais e processos dentro da área química, os polímeros são um bom exemplo da forte influência das interações intermoleculares em diversas propriedades dos polímeros que são essenciais para a extensa aplicabilidade desses tipos de materiais.

Após a análise e apresentação das principais informações e ideias que constam nas publicações selecionadas, com enfoque nas propriedades físico-químicas, um mapa conceitual foi organizado (Apêndice E) com o propósito de evidenciar a rede de conceitos que representa o conhecimento químico sobre as propriedades, através da análise dos artigos selecionados, principalmente, destacando as relações entre esses conceitos.

## 6.2 Estrutura conceitual emergente da pesquisa bibliográfica

### 6.2.1 Conceitos

Com base nas análises realizadas, além dos textos produzidos, quadros e mapas conceituais que foram elaborados a partir dos principais conteúdos conceituais e ideias considerados fundamentais para a plena compreensão das interações intermoleculares, com base na pesquisa bibliográfica efetuada, se faz importante, a proposição de uma estrutura conceitual do tema que representasse tais análises.

Inicialmente, um resumo dos aspectos mais importantes foi apresentado, sugerindo a rede de conceitos, que responda à questão de pesquisa que norteia o trabalho, sobre o que é fundamental que os concluintes de um curso de graduação em química saibam sobre as interações intermoleculares.

Para introdução às interações intermoleculares é importante conhecer a origem dos seus estudos, mesmo que hipóteses e ideias sobre a existência de interações atrativas entre as moléculas tenham sido levantadas há muito tempo por filósofos da ciência, formalmente, a equação de van der Waals é a primeira expressão matemática a utilizar parâmetros que representassem as forças atrativas e repulsivas.

É importante a noção de que a equação de van der Waals é proveniente das alterações efetuadas na lei dos gases ideais, cuja equação não consegue descrever o comportamento dos gases reais e tem origem na associação das equações das leis de Boyle e Gay-Lussac.

E fundamentalmente, a compreensão dos parâmetros **a** e **b**, que depois de estudos de vários gases reais exibiam desvios da equação do gás ideal sob certas condições, a equação é modificada e tais constantes estão relacionadas respectivamente a intensidade das interações atrativas e com o volume efetivo das esferas (interações repulsivas).

Algo que pode ser acrescentado a esse aspecto introdutório das interações intermoleculares é a substituição desses parâmetros **a** e **b** da equação de van der Waals por constantes físicas juntamente com a polarizabilidade molecular culminando em uma “*nova equação*” que tem o potencial de facilitar a aprendizagem do tema e proporcionar uma visão menos abstrata das interações atrativas e repulsivas entre as moléculas (VISSER, 2011).

Após essa introdução é imprescindível que o próximo aspecto a ser abordado junto à sua rede de conceitos e inter-relações dos conhecimentos pertinentes é a

energia de interação, em especial pela capacidade de abranger diversos conteúdos fundamentais para a plena compreensão das interações intermoleculares.

O entendimento de que as principais diferenças entre as ligações químicas e as interações intermoleculares se dão a partir da energia envolvida em cada tipo de ligação/interação, deve ser algo a ser explorado na abordagem do tema, sobretudo a correlação desta energia com as distâncias intermoleculares e a compreensão de que outros fatores influenciam quando se pensa na magnitude do conjunto de interações existentes nos sistemas moleculares.

A energia de interação das forças atrativas de van der Waals pode ser representada por uma equação derivada da lei de Coulomb que relaciona as cargas elétricas em função da separação entre elas. Tal equação é capaz de unificar as interações dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido e dipolo induzido-dipolo induzido através de uma somatória dos termos de cada um desses tipos de interação representados por parâmetros moleculares em função das distâncias intermoleculares (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Nesse sentido, tanto o momento de dipolo quanto a polarizabilidade exercem papel fundamental no âmbito das interações intermoleculares e conseqüentemente os conteúdos que servem de base para o entendimento de tais parâmetros. Dentre esses conteúdos, é possível destacar a eletronegatividade, polaridade, geometria molecular e o conceito de nuvem eletrônica, todos sustentam as explicações do momento de dipolo e polarizabilidade.

Um modelo que proporciona centralidade em relação aos aspectos da energia de interação, principalmente por agregar boa parte dos conceitos intrínsecos nela e o que deve ser mais bem utilizado é o potencial de Lennard-Jones, que a partir do gráfico e junto à equação, ilustra a contribuição das forças atrativas e repulsivas, suas respectivas magnitudes correlacionadas com as respectivas distâncias intermoleculares e o denominado poço potencial que pode caracterizar os diferentes tipos de interações pelas suas intensidades distintas (RIVERA-RIVERA *et al.* 2017).

Concluindo sobre a energia de interação, algo que pode ser considerado um avanço em relação ao tema e ser minimamente apresentado na graduação é o uso das simulações e equações propostas com base em modelos quântico-computacionais que calculam o valor de cada contribuição a partir da decomposição da energia de interação total (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Dentre os tipos de interações, tanto as forças dispersivas quanto às ligações de hidrogênio exibem destaque pela importância, complexidade, correlações e estudos associados ainda recentes na perspectiva das interações intermoleculares. As interações dispersivas que são geralmente vinculadas apenas aos compostos apolares pelo fato de serem realmente dominantes em tais sistemas, todavia, maior ênfase deve ser dada ao caráter universal desse tipo de interação.

Outra característica das interações dispersivas que muitas vezes é negligenciada está relacionada a sua aditividade, fundamental para o reconhecimento da existência de mais de um tipo de interação em sistemas moleculares, em especial a contribuição de dispersão na interação total de compostos polares.

Os principais conceitos necessários ao entendimento das interações dispersivas estão relacionados ao campo elétrico provocando alterações nas nuvens eletrônicas, que nesse contexto são dependentes do parâmetro polarizabilidade, este que talvez seja o conceito mais importante na explicação das forças dispersivas (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Dada essa característica de dependência das forças dispersivas em relação à polarizabilidade, tal parâmetro muitas vezes considerado abstrato pode ser representado no sentido de facilitar a sua compreensão pela área superficial molecular, número de elétrons e refatividade molar, além do destaque que deve ser explorado em substituir equivocadamente a polarizabilidade pela massa molar.

Em outro momento já foi evidenciado e realmente há a demanda por conceitos básicos para a compreensão de parâmetros moleculares como o momento de dipolo e a polarizabilidade, no entanto, no estudo das interações intermoleculares e especificamente das forças dispersivas fica evidente também a importância da noção das estruturas moleculares das substâncias envolvidas nas interações.

As ligações de hidrogênio, que erroneamente ainda são definidas em muitos materiais de ensino de química, como um tipo especial das interações dipolo-dipolo, podem ser interpretadas, como interações eletrostáticas entre um átomo de hidrogênio de determinada molécula com átomos de elementos eletronegativos, comumente nitrogênio, oxigênio e flúor. No entanto, novas definições não ficam restritas a esse aspecto e apontam para a ligação de hidrogênio como a mais fraca de duas ligações doador-receptor competidoras, tal tipo de definição está relacionado tanto à existência de ligações de hidrogênio não clássicas quanto ao grau de covalência da ligação (WEINHOLD; KLEIN, 2014).

Numa introdução ao tema, não seria necessário um aprofundamento, mas seria fundamental a noção de alguns tipos de ligações de hidrogênio não clássicas, assim como as intramoleculares e um conhecimento básico dos fatores que sustentam e influenciam esse caráter covalente da ligação.

Um dos fatores que podem ser utilizados para “mensurar” a covalência desse tipo de interação e o seu domínio é relevante na perspectiva das interações intermoleculares, está relacionado com a direcionalidade da ligação de hidrogênio, por conseguinte torna-se relevante o domínio das distâncias e ângulos típicos de tais ligações, uma vez que o aumento da direcionalidade está vinculado a estes parâmetros.

Mesmo que de forma preliminar, é importante conhecer técnicas que podem auxiliar na identificação da existência das ligações de hidrogênio em sistemas moleculares, a espectroscopia vibracional que por meio do deslocamento e mudanças no espectro de infravermelho pode ser explorada para explicar fenômenos que são afetados pela presença de tais ligações (OLIVEIRA; ARAÚJO, 2012).

Aliás, outro ponto fundamental é a compreensão de inúmeras propriedades e fenômenos físico-químicos que tem por característica a extrema dependência das ligações de hidrogênio e as suas respectivas intensidades junto às alterações estruturais ocasionadas e devem ser exploradas na abordagem do tema, em especial as que envolvem as propriedades dos líquidos e principalmente da água.

E por fim, como foi proposto no contexto da energia de interação, métodos quântico-computacionais podem ser aplicados para detalhar as diferentes contribuições que compõem a energia total da ligação de hidrogênio. Informações que também são utilizadas para proporcionar maiores discussões do caráter covalente da ligação de hidrogênio a depender da intensidade de algumas dessas contribuições.

Para tornar a abordagem das interações intermoleculares mais completa e contextualizada, é muito importante que as propriedades físico-químicas sejam objeto de discussões, reflexões e aprofundamento das interações intermoleculares, uma vez que as interpretações da maior parte das propriedades são fundamentadas pelas interações.

Uma das medidas que são consideradas mais diretas das interações intermoleculares é a variação de entalpia de vaporização, porém, por apresentar comportamento similar, os pontos de ebulição das substâncias são mais explorados no ensino do tema.

Aproveitando essa característica, muitas tendências são reproduzidas como se diferentes propriedades apresentassem a mesma relação com as interações intermoleculares. Em geral, pontos de fusão, viscosidade, tensão superficial, entre outras propriedades, tem especificidades que devem ser detalhadas para justificar e entender as discrepâncias em relação à tendência geralmente seguida pelos pontos de ebulição dos compostos (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

A maioria destas discrepâncias são explicadas por meio de parâmetros como geometria e simetria molecular, polaridade, estrutura molecular e a polarizabilidade, isso torna evidente a importância de um princípio fundamental no contexto do conhecimento químico, que é a relação entre estrutura molecular, a constituição da matéria e as propriedades físico-químicas.

Essas relações que geralmente são representadas por gráficos e tabelas apresentam como peculiaridade o uso de parâmetros moleculares como retrato das interações intermoleculares, especialmente a polarizabilidade que anteriormente era equivocadamente simbolizada pelas massas molares das substâncias.

Ainda sobre esse aspecto, os compostos químicos que conseqüentemente mais são utilizados por facilitarem a compreensão das correlações estabelecidas entre as interações e os fenômenos são os hidretos, hidrocarbonetos e os demais compostos orgânicos. Considerando que muitas explicações são baseadas na relação estrutura-propriedade, os compostos orgânicos proporcionam uma gama de opções de estudos desses aspectos em função da diversidade dada por seus isômeros e diferentes grupos funcionais (STRUYF, 2011).

Concluindo, os fenômenos e propriedades relacionados à solubilidade e aos polímeros são ideais e apropriados para levantar as discussões e os conteúdos conceituais fundamentais ao entendimento das interações intermoleculares, tendo em vista que os principais casos envolvendo a aplicabilidade dos polímeros e o comportamento de misturas são conseqüências das interações.

Um mapa conceitual foi elaborado e foi representado na (figura 29), sintetizando os principais conceitos e suas interrelações, com o propósito de representar a estrutura mínima conceitual para abordagem das interações intermoleculares na graduação em química, com base na pesquisa bibliográfica e na interpretação pessoal defendida com a finalidade de responder à questão de pesquisa da tese.



É válido destacar que o mapa conceitual trouxe diversos aspectos da pesquisa bibliográfica, que fazem parte das ideias-chave abordadas até aqui, que abrangem diferentes conceitos, mais exploradas por cada um dos artigos. Em resumo, esses aspectos mostram a importância de estarem presentes em uma abordagem do tema na graduação em Química.

Primeiramente, a energia de interação que pode ser calculada tanto pela equação de Coulomb quanto por cálculos quântico-computacionais, considerando que esses últimos cálculos também consideram as interações repulsivas. Energia de interação que também pode ser explorada no estudo do potencial de Lennard-Jones, evidenciando a energia envolvida nas interações atrativas e repulsivas em função das distâncias intermoleculares.

As ligações de hidrogênio que para além da definição, envolvendo os átomos mais eletronegativos, podem ser compreendidas como ligações fracas entre doador-receptor competidoras, além de serem diferenciadas a partir das distintas intensidades. Intensidade que são detectáveis via espectroscopia vibracional e podem ser previstas a partir da direcionalidade das ligações de hidrogênio, com base nas distâncias e ângulos típicos dessas ligações.

Aspectos relacionados às interações dispersivas mais destacados na pesquisa, estão relacionados ao caráter aditivo e universal desse tipo de interação, ou seja, a contribuição dessas interações em todos os tipos de substâncias. Além da ênfase no parâmetro polarizabilidade, determinante e fundamental na compreensão da relação estrutura-propriedade.

Uma ideia-chave não menos importante é o entendimento dos aspectos históricos relacionados a equação de van der Waals, a importância dos parâmetros **a** e **b**, como correções utilizadas como evidência da existência de interações intermoleculares.



### 6.2.2 Princípios

Em relação aos principais princípios encontrados com base na análise das publicações selecionadas, se faz necessário uma breve discussão considerando que tais princípios são conceitos gerais e abrangentes que perpassam por todo o conhecimento químico relacionado às interações intermoleculares.

O primeiro princípio que emerge da investigação da literatura científica é o conceito de *Unificação das Interações Intermoleculares*, que deve ser pautado nos diferentes aspectos relacionados ao tópico das interações entre as moléculas. Sobretudo para evitar muitos equívocos quanto ao reconhecimento da existência de mais de um tipo de interação em sistemas moleculares específicos e a identificação de que as contribuições de tais interações, podem ser somadas para quantificar a energia de interação intermolecular total.

É fundamental que no ensino das interações intermoleculares se tenha a noção, que dependendo do sistema estudado, a interação entre as moléculas é a soma dos diversos tipos de forças intermoleculares. Para evidenciar esse aspecto, Bueno (1978) apresenta alguns exemplos de compostos, dispostos na (tabela 16), suas propriedades e os respectivos tipos de interações presentes, que corroboram com o princípio de unificação das interações.

Tabela 16 – Tipos de interações entre as moléculas para alguns compostos.

Composto	P. F. (°C)	P. E. (°C)	$\mu$	M	Tipos de interação*
Metano	-182	-161	0	16	L
Fluoreto de metila	-142	-78	1,8	34	L + I + D
Metanol	-98	+65	1,7	32	L + I + D + H
Etanol	-114	+79		46	L + I + D + H
Ácido clorídrico			1,8	36,5	L + I + D + H

\* L = interações de London, I = dipolo induzido, D = dipolo-dipolo e H = ligações de Hidrogênio.

Fonte: Bueno (1978), p. 29.

A utilização de tabelas, como essa, pode proporcionar o reconhecimento da existência de mais de um tipo de interação em compostos químicos e que por consequência, a energia de interação, é resultando da soma dos distintos tipos de interação.

Outro princípio identificado na análise dos trabalhos está relacionado a ideia de que tanto as *“ligações químicas quanto às interações intermoleculares não apresentam grandes diferenças”*, em especial por serem entendidas como interações eletrostáticas que ocorrem apenas com magnitudes específicas. Esse aspecto é evidenciado quando se observa as curvas de potencial do modelo de Lennard-Jones, onde o formato de tais curvas é semelhante e as intensidades são mais bem descritas por meio dos poços potenciais referentes a cada tipo de ligação/interação (RIVERA-RIVERA *et al.* 2017).

Um princípio que deve ser mais bem explorado no ensino das interações intermoleculares é o *“caráter universal das forças dispersivas”*, ter a noção que independentemente da polaridade das moléculas, sempre haverá contribuição das forças dispersivas para a energia de interação total. Em muitos casos, mesmo entre moléculas fortemente polares, as forças dispersivas são dominantes e este aspecto ainda não é tão difundido nos materiais de ensino sobre interações intermoleculares (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

Ainda sobre as interações dispersivas, um conceito que deve perpassar por todo o tópico de interações intermoleculares é a *“aditividade”* de tais interações, a magnitude atribuída às forças de dispersão que é somada aos outros tipos de interações que estejam atuando em um dado sistema molecular. Característica que inclusive ajuda na interpretação de diversos fenômenos físico-químicos, por exemplo, em processos de adsorção (GOTTSCHALK; VENKATARAMAN, 2014).

Alguns conceitos que podem ser caracterizados como princípios se resumem em propriedades, que contribuem para a *“direcionalidade das ligações de hidrogênio”*, ter uma noção básica das distâncias típicas e ângulos das ligações de hidrogênio é fundamental para a compreensão desse tipo de interação. Em muitos casos, conhecer a distância e ângulo de ligação pode ser determinante na previsão da intensidade das ligações de hidrogênio presentes em moléculas de determinadas substâncias (OLIVEIRA, 2015).

Por fim, um princípio a ser considerado no estudo das interações intermoleculares está relacionado ao entendimento de que há uma *“composição de diferentes forças na energia de interação total”* e isso pode ser mais bem detalhado por meio de equações clássicas e aquelas baseadas em modelos quântico-computacionais (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

É importante ressaltar que a ideia foi a de apresentar alguns dos princípios, que podem ser destacados da análise dos artigos selecionados, com base nos conteúdos conceituais. No (quadro 7) foram elencados os princípios que foram selecionados e que provavelmente atravessam o conhecimento químico dedicado ao estudo das interações intermoleculares.

Quadro 7 - Principais princípios presentes nos artigos analisados na pesquisa bibliográfica.

<b>Princípios</b>
<i>A unificação das Interações Intermoleculares é fundamental para o reconhecimento das contribuições de cada tipo de interação em dados sistemas moleculares</i>
<i>Tanto as ligações químicas quanto as interações intermoleculares não apresentam grandes diferenças em relação à natureza eletrostática</i>
<i>Em todo sistema envolvendo interações entre átomos e/ou moléculas deve ser considerado o caráter universal das forças dispersivas</i>
<i>A intensidade da energia de interação é resultado da composição de várias forças, característico da aditividade das interações</i>
<i>A direcionalidade (distância e ângulos típicos) das ligações de hidrogênio é fundamental para classificar sua intensidade</i>
<i>É essencial a compreensão da composição de diferentes forças na energia de interação total</i>

Fonte: autoria própria.

### **6.3 Opinião de especialistas no tema**

#### **6.3.1 O tema na pesquisa do especialista**

Para o início das entrevistas optou-se por investigar as concepções dos especialistas sobre a importância das interações intermoleculares nas suas linhas de pesquisa, para proporcionar um ambiente favorável ao entrevistado, além de uma reflexão em relação ao tema. A partir das concepções de cada especialista, revelar a complexidade do tema, dada a diversidade de conceitos correlacionados, mesmo com especialistas de áreas consideravelmente próximas.

Mesmo que tenha um aspecto descritivo, faz-se importante apresentar as respostas dos onze especialistas em relação à importância do tema nas suas respectivas linhas de pesquisa, para enfatizar os conceitos distintos que emergem da análise das entrevistas. Como se trata de uma entrevista semiestruturada, nem todas as questões do roteiro podem ser apresentadas exatamente como previstas, pois o caráter de liberdade do entrevistado, que esse tipo de abordagem proporciona, pode resultar no enfoque de determinados assuntos em detrimento de outros.

Segundo o especialista P1, o tema é fundamental ao seu trabalho de pesquisa, dado que a estrutura tridimensional de macromoléculas de interesse biológico, por exemplo, as proteínas ou até mesmo ácidos nucleicos e açúcares, são determinadas pelas interações intermoleculares.

Também a compreensão dos aspectos mecanísticos de fenômenos biológicos numa perspectiva estrutural, está baseada na compreensão das interações intermoleculares, em especial os fenômenos de especificidade e cooperatividade.

P1 conclui afirmando que o próprio funcionamento da célula depende das interações intermoleculares, desde a estrutura da membrana até o comportamento das moléculas no seu interior.

Como se trata de uma entrevista semiestruturada, nem todas as questões do roteiro podem ser apresentadas exatamente como previstas, pois o caráter de liberdade do entrevistado, que esse tipo de abordagem proporciona, pode resultar no enfoque de determinados assuntos em detrimento de outros.

Na entrevista com o especialista P2 ocorre esse processo, a questão sobre a importância do tema na sua linha de pesquisa não é feita diretamente, principalmente devido ao fato de no início da entrevista, P2 discorre bastante sobre o tema na área em que ele ministra as suas aulas na graduação.

No entanto, é possível inferir dois aspectos do tema, que podem ser considerados importantes e extraídos da entrevista com o especialista P2, o entrevistado ressalta que na maior parte das práticas laboratoriais, trabalha-se com substâncias no estado líquido e apesar de não existir teoria de líquidos, sendo o referencial para líquidos, o gás muito denso ou o sólido desorganizado e destaca que as interações intermoleculares são determinantes para a compreensão do estado líquido.

P2 ainda levanta o aspecto do fenômeno da espectroscopia, que segundo o especialista, não pode ser explicado com base nas moléculas isoladas, por consequência, todas as energias vibracionais e alterações das bandas no espectro, dependem das interações intermoleculares e a teoria da perturbação pode ser uma ferramenta para auxiliar na compreensão dessas interações.

Para o especialista P3, a importância das interações intermoleculares na sua linha de pesquisa, está ligada mais à contribuição no entendimento da parte experimental da pesquisa. Resumidamente, o entrevistado explica que os cálculos quânticos realizados nos seus estudos, por meio de softwares, na maioria das vezes, as moléculas estão inicialmente isoladas.

Em seguida, as aproximações são feitas para efeito de solvente, que é claramente inibido pelas interações intermoleculares, no entanto, P3 lembra que diferente dos cálculos de dinâmica molecular, esse efeito do solvente é implícito, as moléculas “sentem” o potencial gerado por esse solvente.

Outro detalhe descrito pelo especialista é que para os seus cálculos, a molécula não é colocada em uma “caixa de solvente”, na sua pesquisa, há um estudo da formação de complexos e em tais complexos podem ter interações inter e intramoleculares. Para saber se existe complexo, primeiro aproximam-se as moléculas e observa-se a ocorrência ou não de interação, para depois acontecer atração.

O especialista ainda retrata que se deve observar isso a todo o momento e na parte experimental, é necessário saber interpretar esses aspectos para explicar os resultados, por exemplo, pode haver efeitos que não estão sendo captados, como algum tipo de interação intermolecular, logo, será necessário aumentar a complexidade do modelo para os cálculos.

De acordo com P3, uma facilidade a ser considerada é o fato de trabalhar na sua linha de pesquisa apenas com sistemas quânticos, pois quando se trabalha com mecânica molecular e dinâmica, deve-se explicitar qual é essa interação, deve-se deixar claro o que acontece. No seu trabalho, simplesmente há que se considerar número de elétrons e a distância, em seguida, o algoritmo baixa a energia e mostra se a ligação/interação acontece ou não.

Segundo o especialista P4, o tema é fundamental à sua linha de pesquisa, visto que a descrição das forças intermoleculares é a base utilizada para fazer todas as simulações de dinâmica molecular ou simulações clássicas de sistemas biológicos, complexos, solvatados, até mesmo proteína e água ou cromóforo em água, em suma, toda essa descrição das interações é essencial para realizar as simulações.

De maneira objetiva, o especialista P5 relata que toda a sua linha de pesquisa explora os efeitos interfaciais e superficiais. Como são todas interações físicas, desde interações dispersivas até iônicas, interessam aos trabalhos do entrevistado, que considera lidar com o esse conceito o tempo todo.

A importância das interações intermoleculares na linha de pesquisa do especialista P6, assim como o seu trabalho, se divide em duas vertentes, a primeira é a parte de aplicação de métodos quânticos e DFT, para o estudo de sistemas moleculares, modelos pequenos de 10 a 15 átomos no máximo. Nesses métodos, são investigadas todas as propriedades possíveis, que os softwares e que os métodos permitem: estrutura, energia de interação, infravermelho, análise dos orbitais moleculares, densidade eletrônica, partição de energia na energia de interação.

Mais recentemente outra área de estudos de P6, tem sido o estudo dos efeitos dos solventes usando métodos contínuos, e esse tipo de abordagem, é para realmente caracterizar as propriedades das ligações de hidrogênio. E isso serve para a modelagem molecular de compostos bioativos, onde se utiliza simulações de docking, fármaco-ligante, fármaco-receptor, enzima-proteína.

Além de métodos de QSAR - Quantitative structure-activity relationships (*Relações quantitativas estrutura-atividade*) tridimensionais, que servem de apoio para caracterizar centros doadores e receptores de carga do fármaco e esses centros doadores e receptores de carga, eles se encaixam na enzima e na proteína, através de interações hidrofílicas ou hidrofóbicas, hidrofílicas são ligações de hidrogênio e



hidrofóbicas, principalmente hoje, é a ligação de halogênio, halogênio interagindo com uma base de Lewis.

Conforme o especialista P7, as interações intermoleculares são imprescindíveis na sua linha de pesquisa, para o entrevistado, a diferença é que na graduação há o ensino das interações entre duas moléculas apenas, desde íon-íon, íon-dipolo, dipolo-dipolo induzido, sempre pensando em duas moléculas interagindo.

Para P7, isso funciona para gases ideais, soluções diluídas, mas em pesquisas mais aplicadas, por exemplo, coloides e materiais sólidos, mesmo as interações sendo do mesmo tipo, elas são de muitos corpos e isso demanda de conceitos de mecânica estatística, basicamente é necessário fazer uma média dessas interações todas.

Portanto, a justificativa da diferenciação de como o tema é visto na graduação para P7, se dá em não investigar duas moléculas interagindo e concluir que a interação só daquelas duas foi responsável pelo fenômeno, pelo efeito, pela propriedade. Desse modo, sua pesquisa, é toda baseada em interações, mas deve-se pôr essa visão estatística, considerar todas as possibilidades de interações.

O especialista P8 considera o tema fundamental para a sua área de pesquisa, o entrevistado afirma que estuda as interações entre biomoléculas o tempo todo e considera que desde biomateriais a vírus, a essência está nas interações intermoleculares.

Já o especialista P9 lembra que quando se trabalha com coloides e associação de moléculas formando coloides, o conceito de interações intermoleculares é muito importante. O entrevistado cita como exemplo, polímeros surfactantes, onde interações intermoleculares de vários tipos estão presentes, são sistemas não covalentes, alguns denominam de supramoleculares, e estes são mantidos por interações moleculares.

Os sistemas estudados nas linhas de pesquisa de P9, segundo o especialista, investiga como as moléculas se associam, que vão desde interações eletrostáticas, interações de van der Waals, ligações de hidrogênio, até os efeitos hidrofóbicos, para P9, tudo isso é bastante central em seus trabalhos de pesquisa.

A entrevista com o especialista P10 também não traz uma resposta direta sobre a importância do tema na sua linha de pesquisa, visto que o modelo de entrevista permite liberdade ao entrevistado quando apresenta as suas concepções.

No entanto, P10 afirma que as interações intermoleculares são inicialmente consideradas de maneira séria, no estudo da liquefação dos gases e o problema conceitual mais crítico, é que os químicos pensam em propriedades de uma molécula isolada, mas experimentalmente, não se trabalha com moléculas isoladas. Nesse sentido, quando se trabalha com um número grande de moléculas, as interações intermoleculares exercem papel central.

Mesmo em espectroscopia, o especialista ressalta que quando uma molécula está num agregado molecular, existem variações da frequência vibracional que é calculada para a molécula isolada, a simetria que é para a molécula isolada e de outras propriedades como o momento de dipolo, a polarizabilidade, etc. Mas as experiências são realizadas com um agregado molecular gigantesco e as interações entre as moléculas não podem ser negligenciadas.

É importante lembrar que a entrevista com o especialista **P11**, foi realizada na forma de questionário e em relação à importância das interações em sua linha de pesquisa, ele responde que é enorme, em especial, no estudo de estados de agregação de líquidos.

A partir da análise de conteúdo, especificamente sobre essa questão da importância do tema nas linhas de pesquisa dos especialistas, as respostas podem ser agrupadas em categorias (quadro 8), evidenciadas pelos conceitos emergentes nas entrevistas e resumidas em um quadro.

Essas categorias denominadas Aplicada, Natural e Descritiva são formas simples de reunir as respostas que apresentam aspectos similares, a primeira concentra as respostas em que os especialistas optaram por demonstrar a aplicabilidade das interações em fenômenos investigados de suas linhas de pesquisas. Em seguida, alguns entrevistados aproveitaram para discutir alguns pontos sobre a natureza das interações e enfatizar o reconhecimento estatístico do enorme número de moléculas envolvido e parâmetros moleculares fundamentais ao tema. Por último, entrevistados que fizeram descrições dos tipos de interações que estão relacionadas com as suas pesquisas.

É importante observar que uma categoria não exclui a outra, obviamente há concepções que retratam as aplicações relacionadas às interações, parâmetros moleculares e descrevem alguns tipos de interações, o Quadro 9 proporciona a compreensão de todos esses aspectos:

Quadro 8 - Categorias das concepções dos especialistas sobre a importância do tema em suas linhas de pesquisa e os principais conceitos relacionados.

<b>Categorias</b>	<b>Definição</b>	<b>Conceitos</b>	<b>P</b>
<b>Aplicada</b>	<i>Compreende as concepções que enfatizam as aplicações e fenômenos físico-químicos em que as interações intermoleculares são determinantes.</i>	Proteínas, ácidos nucleicos, açúcares, fenômenos biológicos, especificidade, cooperatividade, funcionamento da célula, estrutura da membrana, efeito de solvente, sistemas biológicos, complexos, solvatados, fármaco-ligante, enzima-proteína, compostos bioativos, efeitos interfaciais e superficiais, coloides, soluções, gases ideais, biomoléculas, biomateriais, polímeros, efeito hidrofóbico, liquefação, líquidos.	<b>P1 P5 P6 P7 P8 P9 P10 P11</b>
<b>Natural</b>	<i>Compreende as concepções que ao falar da importância do tema, destacam explicações sobre a natureza das interações intermoleculares por meio de parâmetros moleculares, estatísticos e conceituais.</i>	Estrutura, moléculas, teoria de líquidos, moléculas isoladas, espectroscopia, teoria da perturbação, cálculos quânticos, simulação, softwares, dinâmica molecular, elétrons, distância, energia, ligação, interação, modelo, energia de interação, partição de energia, centros doadores e receptores de carga, base de Lewis, mecânica estatística, média das interações, muitos corpos, supramolecular, momento de dipolo, polarizabilidade, aspectos mecanísticos.	<b>P2 P3 P6 P7 P10</b>
<b>Descritiva</b>	<i>Compreende as concepções que acabam descrevendo tipos de interações intermoleculares ao falar da importância do tema em sua linha de pesquisa.</i>	Interações físicas, interações dispersivas, interações iônicas, descrição das interações, ligações de hidrogênio, interações hidrofílicas e hidrofóbicas, ligação halogênio, íon-íon, íon-dipolo, dipolo-dipolo induzido, interações eletrostáticas, interações de van der Waals.	<b>P5 P6 P7 P9</b>

Fonte: autoria própria.

### **6.3.2 Estrutura conceitual emergente das entrevistas com especialistas**

Sobre a categoria que engloba as opiniões dos pesquisadores em relação ao tema na química de maneira geral (item (i)), percepções similares foram identificadas.

Os trechos extraídos das falas dos entrevistados apontam para a importância do tema, para a compreensão de fenômenos físico-químicos, a noção da composição molecular, além da onipresença do tema na química, caracterizada pela forma como está disseminado por todo o conhecimento químico.

...eu acho que é um tema que está espalhado pela química de forma meio que horizontal...(P1)

...fundamental, essencial, porque as moléculas não estão isoladas, então, toda reatividade, toda estrutura química é baseada nessas interações...(P4)

...é o entendimento das interações intermoleculares que fornece a base molecular pra você entender qualquer sistema aplicado, quer seja uma doença, um fármaco, processos de biosseparação...(P8)

Ainda nesta categoria, os outros quatro professores ressaltam a importância do tema na química de maneira geral, em especial na interpretação de fenômenos e propriedades físico-químicas, as falas de P7 e P8 exibem esses aspectos.

...A química, ela lida com a obtenção de substâncias novas e a compreensão das propriedades das substâncias e a aplicação das substâncias para aplicações práticas de interesse. E todas as propriedades de uma substância vêm das interações intermoleculares também...(P7)

...Então, eu vou dizer que não só na química, mas eu acho que em todas as ciências que você procura quantificar e explicar o comportamento de coisas, vamos chamar de coisas, as interações intermoleculares são extremamente fundamentais...(P8)

Na literatura científica da área de ensino de química, existem concepções que estão de acordo com as opiniões dos pesquisadores.

Como aponta Murthy (2006), as interações intermoleculares são determinantes nas propriedades físico-químicas das substâncias e influenciam significativamente nas suas reações químicas, processos de separação cromatográfica e reconhecimento molecular em processos biológicos. Além de considerar que o conceito “interações intermoleculares” é universal e muito importante, logo, deve aparecer com maior ênfase no currículo de um curso superior em química.

Segundo Gottschalk e Venkataraman (2014), as interações intermoleculares são fundamentais em escala molecular e determinantes nas observações em escala macroscópica.

Além de destacar excertos que proporcionam uma síntese das concepções dos especialistas sobre como as interações intermoleculares são fundamentais na química de maneira geral. Faz-se importante detalhar e discutir alguns aspectos levantados na análise de cada entrevista de forma individual, tanto para exposição dos resultados quanto para melhorar a compreensão do que cada especialista considera fundamental no contexto do tema.

É possível inferir que o especialista P1 diante dessa questão, demonstra que a importância do tema no conhecimento químico, está exatamente relacionada ao fato de que, o pleno entendimento de alguns fenômenos e propriedades depende diretamente das interações intermoleculares. O primeiro exemplo utilizado pelo especialista é a solubilidade, o especialista destaca que tal fenômeno deve ser abordado do ponto de vista das interações.

...entender solubilidade... tem que entender interações intermoleculares, né?  
Ou seja, você tem que olhar a solubilidade do ponto de vista de interações intermoleculares...(P1)

O especialista salienta ainda, que os químicos devem olhar para as interações entre as moléculas do soluto com as do solvente, do soluto com as do soluto, e solvente com as do solvente. Primeiramente, tal opinião é pertinente na perspectiva da área de ensino, uma vez que a literatura aponta diversos equívocos de estudantes de graduação em química sobre processos de dissolução, por exemplo, considerar que há formação e quebra de ligações químicas em tal procedimento (SMITH; NAKHLEH, 2011). Outro aspecto interessante na resposta de P1, é o fato de ressaltar a importância de que os químicos interpretem, a partir de uma visão submicroscópica, os diversos processos, propriedades ou fenômenos no conhecimento químico.

Ainda relacionado à questão, o especialista considera que mesmo os químicos que não trabalham com soluções, líquidos iônicos ou moléculas de interesse biológico, que a priori estão fortemente correlacionadas às interações intermoleculares, em outras áreas de trabalho como materiais, ligas metálicas, química teórica, espectroscopia e complexos, os químicos acabam se deparando com

questões relacionadas ao tema também, o que torna fundamental o entendimento do mesmo para a formação do químico.

Semelhante a uma entrevista semiestruturada, o entrevistado tem a liberdade de manifestar as suas opiniões, muitas vezes, uma ou outra questão presente no roteiro de entrevista, não é apresentada pelo fato de outros aspectos que emergem serem explorados ou por possibilitar a inferência a partir do que já foi exposto.

É o que acontece no caso do especialista P2, apesar de não responder diretamente essa questão, foi possível evidenciar a importância do tema na química de maneira geral, na fala dele, sob dois aspectos.

Inicialmente P2 demonstra essa importância ao elencar os fenômenos de tensão superficial e ascensão capilar, como exemplos de consequências da atuação das interações intermoleculares, afirma que o último, historicamente foi fundamental no desenvolvimento do conceito de forças intermoleculares. A tensão superficial também era explorada, sem ainda a plena compreensão da natureza das interações entre as moléculas. Tais aspectos demonstram, como o desenvolvimento do tema foi importante na explicação destes fenômenos, que fazem parte do universo da química, além de outras propriedades que, segundo P2, estão diretamente correlacionadas com as interações como pontos de ebulição e solubilidade.

As concepções do especialista P2, corroboram com o que se observa em livros didáticos de química geral sobre a correlação desses fenômenos com as interações intermoleculares. A própria definição dessas propriedades dos líquidos destaca tal correlação. De acordo com Atkins e Jones (2006):

A tensão superficial é uma consequência do desequilíbrio de forças intermoleculares na superfície de um líquido. A ação capilar é uma consequência do desequilíbrio das forças adesivas e coesivas.

Fica evidente a partir dessas observações do especialista P2, que a compreensão das interações intermoleculares pode ser utilizada como a conexão entre o submicroscópico e as propriedades macroscópicas.

Outro aspecto observado que justifica a importância do tema na química, a partir das percepções de P2, é o fato da maioria dos experimentos e processos químicos laboratoriais serem praticados com substâncias líquidas ou em solução.

...é ausente, mas todo mundo só vai ao laboratório e só usa... o estado líquido, raramente alguém vai lá e faz um experimento em fase gasosa, e toda... todo o curso de química...(P2)

A própria ausência do estado líquido nos livros didáticos pode ser uma das razões, para que o tema interações intermoleculares seja negligenciado no ensino superior em química.

O trabalho de Pappa e Tsapalis (2011), corrobora com essa perspectiva, quando se comparou a atenção dedicada às interações intermoleculares em relação às ligações químicas, em questões nos livros didáticos de química geral. Os dez livros consultados, se dedicam juntos, a um total de número de páginas sobre ligações químicas seis vezes maior que o número de páginas dedicadas às interações intermoleculares.

Ao mesmo tempo, em que P2 percebe a ausência do estado líquido nos livros-texto, o especialista acredita que os fenômenos explicados através das interações intermoleculares, estão disseminados por todo curso de química nas diferentes disciplinas e cita como exemplo o tema nos conteúdos de química orgânica, analítica e físico-química.

Talvez um dos problemas na abordagem do tema durante a formação do químico, seja a falta de um momento, que pode ser entendido como um material didático, uma nova disciplina ou até mesmo em uma disciplina já presente no currículo, que seja dedicado a entender a natureza das interações intermoleculares e a importância delas na interpretação de propriedades e fenômenos macroscópicos.

É exatamente em questões relacionadas ao currículo, que se pode inferir a percepção do especialista P3 sobre o tema na química de maneira geral. O especialista vê o tema sendo abordado o tempo todo no curso, mesmo que de forma implícita e principalmente na disciplina de química geral. Além de considerar que a parte de estatística, vista em físico-química, pode ajudar a compreender como se dá o comportamento das interações no universo macroscópico.

O especialista destaca também, que as interações intermoleculares podem ser o elo que proporciona a interpretação submicroscópica de fenômenos e propriedades físico-químicas.

...as interações intermoleculares para mim, ela reflete bem do micro para... o atômico-molecular para o macroscópico...(P3)

Tal concepção, enfatiza a importância do tema dentro do conhecimento químico, à medida que tal característica pode ser considerada como fundamental e

objetivada durante a formação de um químico, a capacidade de interpretar os fenômenos de caráter macroscópico do ponto de vista submicroscópico ou atômico-molecular.

Na maioria das definições mais gerais sobre a química, ela é considerada a ciência que estuda a estrutura, propriedades e transformações de substâncias e materiais. Os próprios conceitos utilizados na definição da ciência química, evidenciam o papel das interações intermoleculares, visto que tanto a estrutura quanto as propriedades são fortemente correlacionadas com as interações.

Essa é a concepção defendida pelo especialista P4 e foi um dos excertos escolhidos para representar o que a maioria dos especialistas pensa sobre a importância do tema na química de maneira geral. Como já supracitado, P4 afirma que o tema é fundamental, pois as moléculas não estão isoladas, então, toda a reatividade, toda a estrutura química, tem como base as interações intermoleculares.

Apesar de parecer simples, realmente é uma das dificuldades constantes ao se estudar química, a exigência de que os alunos alternem entre visões macroscópicas (observáveis), submicroscópicas e simbólicas da matéria (SMITH; NAKHLEH, 2011). Quando nos referimos, por exemplo, à substância água, somos induzidos, talvez de forma inconsciente, a pensar na molécula de água isolada, seu ângulo de ligação, polaridade, etc. E o entendimento das suas propriedades não estão baseados na ideia de uma molécula, mas no comportamento de um conjunto de moléculas.

Ao explorar com mais detalhes as concepções de P4 sobre a importância do tema na química, o especialista utiliza como exemplo as alterações que podem ser causadas pelo ambiente, no contexto de uma reatividade enzimática. E as interações são fundamentais, por exemplo, para descrever a reatividade do sítio ativo de uma enzima, que pode ser diferente em solução e quando isolada.

Uma forma desenvolvida por P4, como recurso didático, é que o estudante pense inicialmente nas interações existentes entre as moléculas isoladas, um dímero formado por tais moléculas, as suas possíveis geometrias, energias de interação e distâncias intermoleculares. P4 defende, que esse seria o primeiro passo para que o químico entenda a complexidade das interações e tal metodologia evidencia o quanto a reatividade e as estruturas químicas são dependentes das interações.



A entrevista de P5 não traz muitos detalhes sobre suas concepções referentes a importância do tema na química de maneira geral, é possível inferir apenas, que o especialista considera as consequências das interações intermoleculares responsáveis pela explicação das diferentes propriedades físico-químicas dos líquidos.

Um trecho da entrevista com o especialista P6, que demonstra a relevância das interações intermoleculares na química, quando o especialista exerce orientação de trabalhos de conclusão de curso de graduação em química, procura demonstrar que diversos temas da química, podem ser abordados com ênfase nas interações, em especial nas ligações de hidrogênio.

...Eletroquímica, vamos trazer a eletroquímica aqui pra ligação de hidrogênio, estudou o que? Cromatografia, vamos trazer aqui cromatografia, o quê que tem a ver, vamos estudar isso. Você viu o quê, espectroscopia no infravermelho? Traz aqui, você viu o quê síntese orgânica? Traz aqui, vamos juntar isso. Transformar a ligação de hidrogênio e transformar esse conteúdo em ligação de hidrogênio e vice-versa...

A interpretação de fenômenos distintos a partir da perspectiva das interações, demonstra o quanto a compreensão do tema pode contribuir para o conhecimento químico, sobretudo por ser fundamental na interpretação submicroscópica de propriedades e processos.

O especialista P7 vê as interações intermoleculares como fundamentais em química, inicialmente, chama a atenção para o fato de que em muitos fenômenos ou processos químicos, as mudanças são atribuídas ao “meio”, de forma a negligenciar que esse “meio” são as forças intermoleculares distintas e atuantes.

Em suma, o exemplo dado pelo especialista para descrever a importância do tema, trata de um dado pigmento para tintas, que apresenta cores diferentes na presença de solventes distintos, revelando que as mesmas moléculas, por interações intermoleculares pode apresentar mudanças de cor.

Segundo o entrevistado, a química também trabalha com a obtenção de novas substâncias e a compreensão das propriedades de tais substâncias se faz importante para aplicações práticas de interesse, por sua vez, as propriedades são consequências das interações intermoleculares.

Ainda sobre a importância das interações, P7 argumenta, que seja do ponto de vista teórico ou prático, não há como desconsiderar as interações, visto que não se tem aplicações baseadas em gás ideal e mesmo os cálculos quânticos, serão caracterizados como limitados se apenas moléculas isoladas forem consideradas.

As concepções desse especialista enriquecem as justificativas de que as interações intermoleculares exercem um papel fundamental no conhecimento químico, pois fica evidente que o tema é um elo entre os universos atômico-moleculares e macroscópicos, além da previsibilidade de transformações e processos que são fundamentados na existência e efetividade das interações entre moléculas.

As concepções do especialista P8 também apresentam tal raciocínio, de que as interações intermoleculares são fundamentais e transcende o conhecimento químico, principalmente por ser a base de explicação do comportamento dos materiais em geral. E ressalta que o conhecimento do tema, proporciona a capacidade do trânsito entre problemas aplicados de áreas distintas.

O especialista P9, no momento da questão sobre a importância das interações intermoleculares de maneira geral, inicialmente aborda aspectos relacionados ao currículo, defendendo que a abordagem do tema seria mais propícia em físico-química. Mas, é possível inferir, por meio da análise da sua entrevista completa e destacar que o tema é essencial para a química. Segundo P9, muitos fenômenos físico-químicos podem ser descritos pelas interações eletrostáticas entre as moléculas e mesmo os que são regidos por efeitos entrópicos, demandam da compreensão das limitações e atuação das forças atrativas e repulsivas presentes em um sistema molecular.

Os exemplos de fenômenos do cotidiano constantes nas respostas do especialista, são sempre fundamentados na interpretação submicroscópica e considerando a forma com que as interações, podem ou não influenciar no comportamento dos materiais.

O especialista P10 traz uma reflexão sobre algo que ele considera um problema conceitual e que demonstra o quão essencial é a compreensão das interações intermoleculares no contexto de tal problema. Não é possível explicar os fenômenos e propriedades de uma substância a partir de uma molécula isolada, como P10 deixa claro nesse trecho.

...os químicos em geral pensam em propriedades de uma molécula isolada, uma molécula de metano é tetraédrica, uma molécula de água, etc. Na verdade, embora a gente calcule propriedades de moléculas isoladas com uma precisão razoável, mesmo pra moléculas mais complexas, experimentalmente você não trabalha com uma molécula...(P10)

Tal concepção demonstra a importância das interações intermoleculares para a compreensão de inúmeras propriedades macroscópicas. A origem de muitos equívocos está relacionada ao enfoque nas propriedades de apenas uma molécula, conhecer, por exemplo, o momento de dipolo, ângulo de ligação e a eletronegatividade dos átomos de uma molécula, não é exatamente a base de explicação para entender o ponto de ebulição de uma substância.

Como afirma P10 na sequência, experimentalmente trabalha-se com  $10^{15}$ ,  $10^{20}$  moléculas e cita como exemplo, que conhecer quão forte é a ligação tripla entre átomos de nitrogênio, não o faz entender a existência da substância nitrogênio ( $N_2$ ) líquido.

Mesmo que haja essa preocupação conceitual entre a distinção de molécula e substância, é fundamental a reflexão sobre a interpretação submicroscópica dos fenômenos, numa perspectiva que dê ênfase as interações existentes entre as moléculas, visto que as próprias simulações são realizadas considerando um agrupamento de moléculas e não observando a molécula isoladamente.

O especialista P11, que apresentou as suas concepções através de um questionário, argumenta que as interações intermoleculares são fundamentais para a química de uma maneira geral, principalmente, porque a química acontece essencialmente no estado líquido, sobretudo na bioquímica.

Em síntese, as opiniões dos especialistas acerca da questão sobre a importância do tema na química estão relacionadas ao papel fundamental das interações intermoleculares na interpretação atômico-molecular dos fenômenos e propriedades físico-químicas. Para muitos dos entrevistados, o tema pode ser responsável por conectar os universos submicroscópico e o macroscópico no contexto da ciência química.

Outro aspecto bastante evidenciado pelos especialistas é o fato de que, na prática, não se trabalha com moléculas isoladas e sim com um grande número de moléculas, conseqüentemente, a compreensão das interações intermoleculares é fundamental para entender o comportamento de tais moléculas em transformações

físicas, nas estruturas dos materiais, na reatividade das substâncias e em processos químicos e biológicos.

Grande parte também considera que a química é significativamente desenvolvida em caráter experimental, com práticas realizadas com substâncias no estado líquido e se torna imprescindível o entendimento das forças atrativas atuantes nos sistemas líquidos e reconhecem que o tema ser negligenciado pode estar relacionado também, com a ausência de discussão do estado líquido nos livros didáticos de química.

Conclui-se sobre as percepções dos entrevistados em relação à importância do tema na química, que há uma concordância dos especialistas sobre o tema estar disseminado por todo o conhecimento químico, sobretudo nas diferentes disciplinas de um curso de graduação em química, constatando que o tema atravessa vários conteúdos do ensino superior em química.

O objetivo central das entrevistas era o de levantar os principais conceitos que, na opinião dos entrevistados, um químico não poderia deixar de saber após o seu curso de graduação. A partir das respostas digitadas, foram separados os conceitos citados por cada um dos especialistas. A partir de uma lista com todos os conceitos citados, foi construída nuvem de palavras (figura 30). Os conceitos que estão em maior destaque (letras maiores) na nuvem, representam os que foram mencionados pelo maior número de especialistas e as cores foram utilizadas para diferenciar os termos.

Figura 30 - Conceitos fundamentais mais citados pelos especialistas entrevistados.



Fonte: autoria própria.

Foram representadas em vermelho, as propriedades moleculares relacionadas à disposição dos átomos e principalmente dos elétrons nas moléculas. Em preto, foram exibidos os tipos de interações intermoleculares, constantes nas argumentações dos entrevistados.

Os conceitos relacionados a representação das interações atrativas e repulsivas, e correlações da força de tais interações com as separações entre as moléculas, foram apresentadas em azul.

Os conceitos “solubilidade” “entropia” e “espectroscopia” estão representados em cores diferentes, o primeiro por ser considerado um conceito muito abrangente no tema, o segundo por ser fundamental na explicação de muitos fenômenos que não são completamente elucidados somente com o arcabouço das interações e o terceiro por ser considerada uma das principais técnicas de detecção das interações.

Analisando a (figura 32), “interações eletrostáticas” e “solubilidade” foram os únicos conceitos mencionados por todos os pesquisadores. O primeiro termo foi evocado de forma literal, por nove dos entrevistados e apenas P5 as denominou de interações físicas.

O contexto da maior parte das alusões ao conceito está centrado em evidenciar, que todas as interações intermoleculares são essencialmente

eletrostáticas, aspecto frequente em livros de química geral, em que elas são atribuídas às interações coulômbicas entre cargas separadas por uma distância.

O termo solubilidade, aqui, representa outros conceitos que tratam deste fenômeno, como “soluções”, “solvatação”, “dissolver” e “solvente”. Tal propriedade é muito utilizada para ilustrar de forma macroscópica, a dinâmica das interações intermoleculares, sobretudo quando se sabe que o processo de solubilização é consequência das interações entre soluto-soluto, soluto-solvente e solvente-solvente.

Mais importante que descrever a frequência de pesquisadores que enunciaram os conceitos presentes na nuvem, é a tentativa de organizar em categorias representativas de cores distintas, uma vez que todos os conceitos apresentados foram citados por cinco ou mais entrevistados, com exceção de “equação de van der Waals” que foi referida, apenas, por três pesquisadores, mas foi mantida na nuvem dada sua importância na origem dos estudos das interações entre as moléculas.

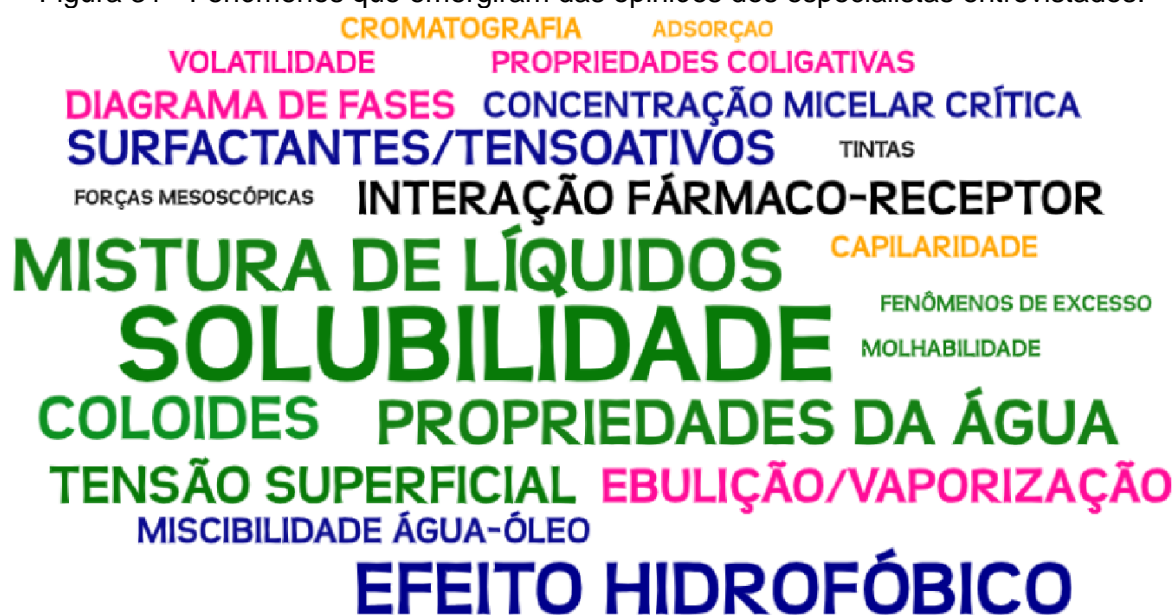
Nota-se que é fundamental a compreensão dos parâmetros moleculares, representados em vermelho, tais parâmetros sugerem a ideia de entender as moléculas por meio da distribuição de cargas em suas estruturas. Outro aspecto importante é conhecer os tipos de interações intermoleculares, exibidos na nuvem, em preto. Fundamentalmente todas são de natureza eletrostática, logo, entende-se que a compreensão desta natureza pode ser um princípio unificador do tema, uma vez que o ensino, geralmente baseado na apresentação e estudo separado de cada um dos tipos de interação, pode prejudicar uma visão unificada das interações, dificultando, por exemplo, o reconhecimento de que diferentes tipos de interações podem atuar em um mesmo sistema molecular (DA SILVA; QUADROS; RODRIGUES, 2011).

No entanto, não deixa de ser importante o domínio das características e especificidades de cada tipo de interação. Em seguida, outros conceitos que emergem das entrevistas dos pesquisadores, foram agrupados em azul e estão relacionados com a energia de interação, essencial para compreensão da magnitude das interações e sua correlação com a distância intermolecular, haja vista, ser constante em livros didáticos, as tabelas que apresentam tipo de interação, energia e a dependência da distância ( $1/r^n$ ).

Na (figura 31) é apresentada uma nuvem de palavras, contendo os fenômenos físico-químicos sugeridos pelos pesquisadores, como relevantes para estudar as interações intermoleculares, além de outros fenômenos reportados no decorrer das entrevistas. Fica evidente a abrangência do tema na química, pela diversidade representada por vinte e um fenômenos diferentes, cinco destes, foram citados apenas uma vez por professores distintos. Os fenômenos mencionados por mais especialistas tem maior destaque (letras maiores), tais como, solubilidade, mistura de líquidos, efeito hidrofóbico e propriedades da água, foram referidos por mais da metade dos pesquisadores.

A categorização representada por cores diferentes buscou organizar os fenômenos por mínimas especificidades, dado que praticamente todos os fenômenos estão relacionados com as interações intermoleculares em líquidos, soluções aquosas e sólidos, ou seja, na fase condensada. Em verde, estão representados fenômenos físico-químicos vinculados a processos em meio aquoso ou à própria água. Propriedades envolvendo correlações entre as interações e mudanças de pressão e temperatura, representados em cor-de-rosa. Fenômenos em que há a participação de moléculas anfifílicas, foram exibidos em azul e se destacam por estarem muito presentes no cotidiano. Em laranja, os três fenômenos apresentam interações que ocorrem entre líquidos e superfícies sólidas e em preto constam interações em macromoléculas e uma aplicação industrial, que depende das interações de uma molécula específica com o meio (solvente).

Figura 31 - Fenômenos que emergiram das opiniões dos especialistas entrevistados.



Fonte: autoria própria.

É importante pontuar que, ao observar o roteiro de entrevista nota-se que a questão “Qual seria um fenômeno ou processo ideal para discutir o tema?”, pode ter influenciado a resposta de cada pesquisador, no sentido de citar apenas um fenômeno. Mas muitos dos especialistas recorriam a exemplos de fenômenos/processos durante a argumentação em suas repostas a outros questionamentos. Mesmo assim, mais uma vez, há que se destacar o papel fundamental das interações intermoleculares na interpretação/explicação de uma gama de fenômenos/processos físico-químicos.

O (quadro 9) esclarece melhor os dados das nuvens e traz os conceitos em destaque de cada entrevista, ou seja, o conceito em que cada entrevistado aprofundou ou elaborou mais durante a entrevista. Também apresenta, os conceitos em comum que emergiram durante as falas dos pesquisadores, além dos fenômenos sugeridos por cada um, como forma de abordar o tema na graduação. Por fim, são elencados também outros fenômenos citados durante a entrevista pelos mesmos e outros extraídos do todo da entrevista.



Quadro 9 - Síntese dos conceitos fundamentais e fenômenos acerca do tema.

Pn	Conceitos em destaque	Conceitos em Comum	Fenômenos sugeridos para abordar o tema	Outros fenômenos citados durante as entrevistas
P1	Estrutura Molecular	Interações Eletrostáticas	Efeito Hidrofóbico	Coloides
P2	Interações Eletrostáticas	Polaridade	Capilaridade	Ebulição/Vaporização
P3	Densidade Eletrônica	Polarizabilidade	Volatilidade	Mistura de Líquidos
P4	Potencial de Lennard-Jones	Forças Dispersivas	Solubilidade	Diagrama de Fases
P5	Forças dispersivas	Energia de interação	Tensão Superficial	Propriedades da Água
P6	Potencial Eletrostático	Densidade Eletrônica	Interação Fármaco-receptor	Propriedades Coligativas
P7	Energia de Interação	Momento de Dipolo, Forças de van der Waals	Fenômenos de Excesso	Cromatografia
P8	Geometria Molecular	Estrutura Molecular	Concentração Micelar Crítica	Tintas
P9	Polaridade	Ligação de Hidrogênio	Miscibilidade Água/Óleo	Forças Mesoscópicas
P10	Substâncias	Solubilidade	Liquefação de gases	Adsorção
P11	Líquidos	Geometria Molecular	Líquidos iônicos	Molhabilidade
		Espectroscopia		Surfactantes/Tensoativos
		Distância Intermolecular		Cristalização
		Entropia		Solvatação
		Dipolo-Dipolo		Desnaturação de proteínas
		Íon-Dipolo		

Fonte: autoria própria.

O (quadro 9) mostra a profusão de conceitos e fenômenos citados pelos 11 entrevistados. Vale ressaltar que, com exceção de P1 e P8, que deram grande destaque ao mesmo conceito de estrutura ou geometria molecular, os demais deram destaques a conceitos distintos. Outros 17 conceitos (conceitos comuns) foram citados por pelo menos cinco dos entrevistados. Ele pode se observar para os fenômenos indicados, como ricos para abordar o tema no ensino. Outros 15 fenômenos foram citados durante as entrevistas. O que indica a larga presença do tema em diversos assuntos abordados pela Química.

Considerando os conceitos em destaque de cada entrevista, que estão relacionados com a pertinência e ênfase com que os pesquisadores citaram os termos nas suas respostas. É possível perceber, que um conjunto de conceitos destacados

pelos entrevistados está associado à natureza e origem das interações, além do aspecto da magnitude das interações e da separação intermolecular.

Alguns excertos das transcrições das entrevistas constatarem tais percepções a respeito do tema:

...mas uma conversa mais filosófica que eu já tive aqui com alguns colegas é, no fundo, todas são eletrostáticas, é tudo lei de Coulomb...(P7)

...outra maneira de pensar quantitativamente é você ter na cabeça aquelas tabelas, que a gente já discutiu, com valores de energia de interação...(P1)

...como você tem essa potência, essas potências diferentes de leis de atração e repulsão, mais intensa e menos intensa dependendo da distância que tem essa espécie, para mim esse é um grande modelo, Lennard-Jones...(P3)

Os demais conceitos em destaque são representados por parâmetros moleculares, como densidade eletrônica, polaridade, polarizabilidade e potencial eletrostático molecular, que são extremamente importantes nas classificações dos diferentes tipos de interações atuantes num sistema molecular. E também conceitos, como estrutura e geometria molecular, demonstram que nas concepções dos sujeitos da pesquisa, o entendimento do arranjo espacial das cargas elétricas nas moléculas, é imprescindível ao tema. Como pode ser verificado nos excertos a seguir.

...densidade eletrônica, posso não usar esse termo, mas eu espero que os alunos percebam. "Olha, esse aqui é mais levemente negativo, os elétrons estão mais desse lado". Então a gente tem uma característica dessa molécula...(P3)

...o reconhecimento de ácido e base, Teoria do Orbital Molecular e Potencial Eletrostático Molecular, esses são os conceitos básicos...(P6)

...a forma geométrica das moléculas acaba sendo muito importante, principalmente se você for aplicar as interações em contexto químico...(P8)

...vai discutir interações de van der Waals, você vai acabar falando em tamanho de átomos ou você vai discutir polarizabilidade que tem certa correlação com o tamanho do átomo...(P1)

Analisando alguns conceitos em comum que emergiram das análises das entrevistas, como momento de dipolo e polarizabilidade molecular percebe-se que eles sugerem a ideia de propriedades moleculares representada pela distribuição dos elétrons nas moléculas. A partir disso, é possível observar que o tema interações intermoleculares, deve ser abordado com ênfase em parâmetros moleculares.

Outros conceitos que emergem das entrevistas dos pesquisadores, como forças de van der Waals, forças dispersivas e ligação de hidrogênio, convergem com

a ideia, de logo depois das propriedades moleculares, se faz importante o entendimento dos diferentes tipos de interação na compreensão do tema.

Assim, os conceitos fundamentais apresentados pelos pesquisadores estão em consonância com a hipótese defendida no presente estudo sobre o tema na graduação, em que as questões relevantes, que precisam ser abordadas nos processos de ensino e aprendizagem para a compreensão das interações intermoleculares, estão vinculadas ao entendimento da estrutura molecular e utilização das propriedades moleculares, polarizabilidade e polaridade, na interpretação de sistemas com interações intermoleculares.

De acordo com os entrevistados, é comum e apropriado explicar as correlações das interações intermoleculares com fenômenos físico-químicos, desde propriedades, como pontos de fusão e ebulição, tensão superficial, solubilidade, volatilidade, propriedades coligativas, até aplicações em espectroscopia, cromatografia, diagrama de fases, efeito hidrofóbico e exemplos na natureza.

Sobre estes aspectos, Murthy (2006) considera que um dos primeiros objetivos da educação química, é instruir os estudantes de química a compreender a relação entre estrutura molecular e suas propriedades.

Para se chegar a uma possível estrutura conceitual foram marcados cada um dos conceitos presentes na transcrição de cada uma das entrevistas. Foram utilizados como referência os conceitos presentes no (quadro 15), no entanto, outros conceitos não presentes neste quadro, mas significativos no contexto da entrevista, também foram assinalados. Em seguida, foram estabelecidas as relações entre cada um dos conceitos anotados e construído um mapa conceitual, que resume as relações conceituais estabelecidas por cada um destes entrevistados. Estes mapas conceituais estão presentes no (Apêndice F) e serviram de base para se chegar a um mapa conceitual final que será apresentado mais adiante.

### 6.3.2.1 Conceitos

Dentre as entrevistas realizadas, foi possível elencar os principais conceitos, que constituem a estrutura mínima de conhecimentos junto aos dados/fatos e princípios e, proporcionar as percepções dos especialistas sobre o tema.

Inicialmente, é significativamente relevante que as interações intermoleculares sejam reconhecidas, como parte integrante das forças eletromagnéticas, que junto às forças gravitacional, nuclear forte e nuclear fraca, constituem as quatro forças fundamentais da natureza.

Também se faz importante, um resgate do contexto histórico do tema, em especial, através do estudo dos gases ideais/reais, onde, a partir da equação de van der Waals e os parâmetros **a** e **b**, tem-se a noção das forças atrativas e repulsivas por meio das correções para a atração entre as moléculas e para o volume molecular, respectivamente.

As interações intermoleculares podem ser caracterizadas como interações eletrostáticas, desde as interações que envolvem íons, interações de van der Waals até as ligações de hidrogênio, logo, a aplicação da Lei de Coulomb, é importante para determinar a magnitude das forças eletrostáticas existentes entre as moléculas em função da distância.

E nesse contexto, dois aspectos são fundamentais, a energia de interação, principal característica que diferencia cada tipo de interação e/ou ligação química e, pode ser calculada de maneira clássica por meio de equações, que são representadas por uma somatória dos termos de cada contribuição, constituídos por parâmetros moleculares, correlacionados a uma distância intermolecular específica.

Outro aspecto, é a possibilidade de decomposição da energia de interação total, através de cálculos quânticos e softwares de simulação computacional, em tais modelos, essa energia é dividida nos termos eletrostático, indução, dispersão, transferência de carga e repulsão.

Principalmente, se dímeros forem utilizados como exemplos, o potencial de Lennard-Jones pode ser uma alternativa interessante para a abordagem das interações, por reunir os conceitos de energia de interação em função das separações intermoleculares, além do gráfico que enfatiza as forças atrativas e repulsivas, também denominadas de longo e curto alcance e, o equilíbrio no poço potencial.

Alguns parâmetros moleculares são essenciais para a compreensão da natureza das interações intermoleculares e todos eles relacionados com a distribuição

de cargas nas estruturas moleculares. O momento de dipolo, fundamental nos processos de polarização, indução, requer os conceitos de eletronegatividade e simetria molecular.

A polarizabilidade que é determinante para as forças dispersivas e apresenta correlação com diferentes propriedades físico-químicas, está associada à capacidade de distorção da nuvem eletrônica de átomos ou moléculas, por conseguinte, os conceitos de raio atômico, geometria e da própria densidade eletrônica, são necessários para o entendimento desse parâmetro molecular.

Quando se aborda as interações intermoleculares, além das interações atrativas, as forças de repulsão devem ser consideradas e um dos conceitos apropriados para a explicação da natureza desse tipo de interação, é o Princípio de Exclusão de Pauli.

Devido as suas especificidades, as ligações de hidrogênio merecem destaque e entre as informações básicas sobre esse tipo de interação estão a noção da magnitude da energia de ligação, distância e ângulo típicos da ligação de hidrogênio. Podem ser caracterizadas como eletrostáticas, embora, via modelos quântico-computacionais, algumas ligações exibem covalência, mas há predominância do caráter eletrostático, até mesmo entre as ligações de hidrogênio não clássicas, que precisam ser mais exploradas na graduação.

Um dos maiores consensos dentre as opiniões dos especialistas é observado nas justificativas, sobre a importância do tema na graduação em química. Como foi abordado em outro momento, aqui, cabe apenas ressaltar, que o tema está disseminado nas diferentes disciplinas do curso e correlacionado com inúmeros fenômenos físico-químicos, sobretudo os que envolvem água, que em alguns casos, também demandam de fatores entrópicos.

Em relação a princípios, que são conceitos muito gerais, com certo nível de abstração, conformam a base de organização conceitual e transpassam pelos conteúdos, é possível destacar como princípio, a ideia de visão molecular. A interpretação de fenômenos e explicação de propriedades, a partir do ponto de vista atômico-molecular, tal perspectiva, deve estar presente no contexto de ensino e aprendizagem da química, sobretudo das interações intermoleculares.

Outro princípio implícito na ênfase de equações de energia de interação é a unificação das interações que salienta o reconhecimento de mais de um tipo de

interação em sistemas moleculares e o caráter aditivo e universal das interações dispersivas.

E por final, o ensino das interações pode ser pautado por teoria, experimentação e simulação, principalmente, por possibilitar o princípio de que as moléculas não estão isoladas, conseqüentemente, os fenômenos dependem do comportamento de um grande número de moléculas que não são estáticas, isso tudo, fundamentado em conceitos estatísticos, que evite a confusão conceitual entre molécula e substância.

Um mapa conceitual (figura 32) foi elaborado na tentativa de sintetizar o que emergiu das onze entrevistas com base nos conteúdos conceituais, logo, foram elencados os dados/fatos, conceitos e princípios que estruturam o tema interações intermoleculares. Embora tal síntese não siga um modelo quantitativo, a estrutura organizacional do mapa conceitual acerca do tema, reúne o que ampla maioria dos especialistas considera fundamental que um químico saiba do tema.

A estrutura mínima de conhecimento foi construída com base nos conteúdos conceituais, que emergiram da análise das entrevistas com os especialistas e foram divididos entre dados/fatos, conceitos e princípios. Tal estrutura exhibe também as relações entre esses conteúdos conceituais e as principais ideias relacionadas ao tema investigado e identificados na análise.

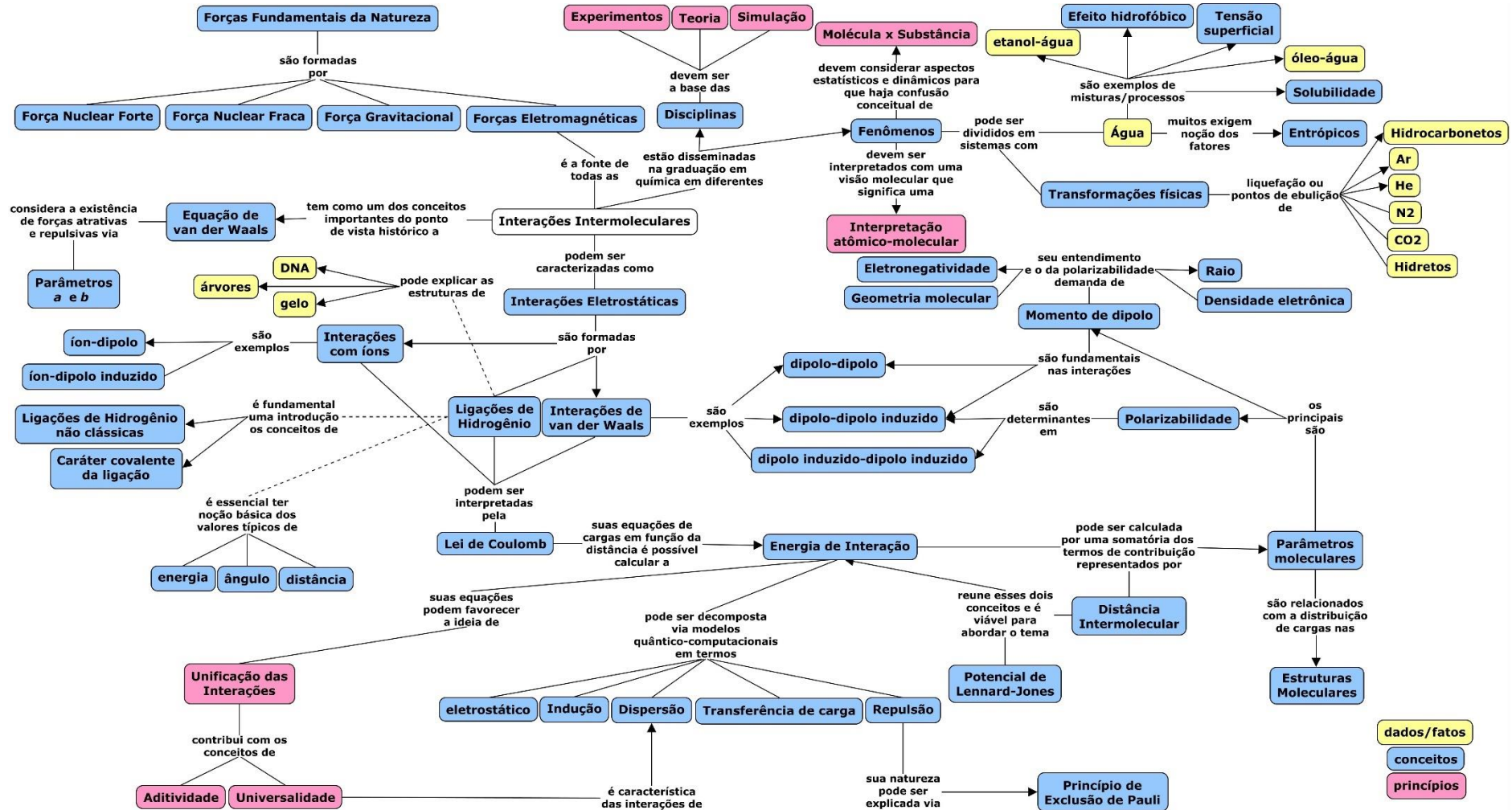
É fundamental destacar que o mapa conceitual trouxe diversos aspectos provenientes das entrevistas, que podem ser divididos em partes, eventualmente mais explorados por cada um dos entrevistados. Em resumo, esses aspectos mostram a importância de estarem presentes em uma abordagem do tema na graduação em Química.

Primeiramente, conhecer a origem das interações intermoleculares e seu processo histórico, além da sua classificação dentre as quatro forças fundamentais. A compreensão da natureza eletrostática dessas interações intermoleculares e características dos diferentes tipos. Reconhecer a onipresença do tema nas inúmeras disciplinas do ensino superior em química e em diferentes fenômenos físico-químicos dentro do conhecimento químico, mostrando a importância da interpretação submicroscópica de tais fenômenos, fundamentada pelas interações intermoleculares. Lembrando dos fatores entrópicos a serem considerados em muitos desses fenômenos, em especial, aqueles envolvendo água e soluções. A essencial noção da energia de interação, para inicialmente, diferenciar as interações/ligações.

Em seguida, explorar o uso de equações para cálculo da energia de interação total, considerando as contribuições de cada tipo de interação, representadas pelas relações entre parâmetros moleculares e distâncias intermoleculares. Além das equações proporcionarem a ideia de unificação e aditividade das interações e do caráter universal das forças dispersivas. Por fim, a compreensão plena do potencial de Lennard-Jones pode auxiliar no entendimento da relação entre as interações atrativas e repulsivas em função das distâncias intermoleculares, para diferentes átomos e moléculas.

Nesse sentido, o mapa conceitual consegue resumir e organizar as principais ideias sobre o tema interações intermoleculares na graduação em química, que na concepção dos onze especialistas são fundamentais que um químico saiba.

Figura 32 - Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos das entrevistas com todos os especialistas.



Fonte: autoria própria.



Observando o mapa conceitual correspondente à estrutura conceitual das interações intermoleculares, com base na concepção de especialistas, se faz importante apontar algumas conexões entre alguns aspectos presentes, citados anteriormente.

O próprio conceito de interações intermoleculares conecta às quatro forças fundamentais da natureza com as interações eletrostáticas, que ao serem classificadas em seus diferentes tipos, podem ser interpretadas através da Lei de Coulomb. A equação da Lei de Coulomb, que faz o elo entre essas interações eletrostáticas e a energia de interação, onde as cargas são representadas por parâmetros moleculares correlacionadas às distâncias intermoleculares. A energia de interação calculada pela somatória de vários termos via equação, consegue interligar ideias fundamentais no ensino do tema, como a unificação e aditividade das interações, além de evidenciar a universalidade das interações dispersivas. Cada termo que compõe a energia de interação total, representado por parâmetros moleculares, que são conectados à graduação em química, na medida que, costumeiramente, são abordados na introdução do tema. E a última conexão foi estabelecida entre as disciplinas da graduação e os fenômenos físico-químicos, pois a compreensão plena desses fenômenos (macroscópico), está fundamentada nas interações intermoleculares (submicroscópico), logo, as especificidades de cada fenômeno somente são abordadas no desenvolvimento das diferentes disciplinas.

### 6.3.2.2 Princípios

Em relação aos princípios que foram selecionados a partir da análise das entrevistas com especialistas, se faz importante, uma breve discussão, considerando que tais princípios são conceitos específicos, que perpassam por todo o conhecimento químico relacionado às interações intermoleculares.

O primeiro princípio que emerge da investigação das entrevistas está relacionado à onipresença das interações intermoleculares no conhecimento químico, “*o tema interações intermoleculares está espalhado pela química de forma meio que horizontal*” (P1). Até mesmo no decorrer do presente trabalho já foi demonstrado, que diversos fenômenos e propriedades de substâncias químicas, são explicados pela atuação das interações entre as moléculas, além de ser constante nas diferentes disciplinas do currículo do ensino superior em química (JASIEN, 2008).

Outro princípio defendido nas entrevistas, que deve estar presente na abordagem dos conteúdos conceituais relacionados às interações intermoleculares, é a ideia que, muitas vezes, foi denominada no presente trabalho de “visão molecular”, “*o químico tem que ter uma interpretação mais molecular e até atômica dos fenômenos*” (P1). É fundamental que no processo de formação do químico, a interpretação de fenômenos e propriedades dos materiais, seja pautada no comportamento e interação entre átomos e moléculas, em geral, os estudantes utilizam pouco o modelo corpuscular em suas explicações, nessas interpretações de fenômenos (POZO; CRESPO, 2009).

A ideia de compreender que as diferentes interações intermoleculares, podem atuar simultaneamente em um sistema molecular, também foi caracterizada, como um princípio a ser considerado na abordagem do tema, “*eu acho que falta essa visão de unificando as interações moleculares e não aquele mero discurso, que é dogmático*” (P2). Os tipos de interações, muitas vezes são abordados de forma individuais e não há um momento, em que se trabalhe a ideia, de que muitas dessas interações podem estar atuando no mesmo sistema molecular, por exemplo, entre moléculas de amônia não há apenas ligações de hidrogênio, mas também contribuições de interações dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido e dipolo induzido-dipolo induzido. Uma visão unificada das interações, poderia evitar o não reconhecimento de mais interações presentes em distintas substâncias e, isso deve ser considerado, durante toda a abordagem do tema (RODRIGUES; Da-SILVA; QUADROS, 2011).

Um princípio que deve permear o conhecimento das interações intermoleculares está relacionado a evidenciar, a diferença conceitual entre molécula e substância, fundamental na compreensão do tema, *“existe uma separação muito grande, conceitual, sobre o que é molécula e o que é substância, sobre o que é que é micro, atômico e o que é que é macro. E a gente tem que saber fazer essa ponte. E aí pesa interações intermoleculares”* (P3). A interpretação de fenômenos e propriedades, percebidos macroscopicamente, é fundamentada nas características e parâmetros moleculares e é essencial, a noção de que as substâncias são constituídas por uma quantidade imensa de moléculas interagindo e as propriedades da substância, como o ponto de ebulição, emergem da organização das partículas que a formam (TORRES *et al.*, 2010).

Tanto na pesquisa bibliográfica, quanto nas entrevistas com especialistas, diferentes aspectos sobre as ligações de hidrogênio foram abordados e, nesse contexto, um princípio que ajuda a entender a energia de tal ligação, *“aquela ligação de hidrogênio é a interação, é, eles não entendem que a ligação de hidrogênio é uma composição”* (P4). Em alguns materiais didáticos ainda persiste a ideia de que, a ligação de hidrogênio, é um tipo especial de interação dipolo-dipolo e se faz importante, uma discussão das diferentes contribuições que compõem a energia da ligação de hidrogênio (HERBST; MONTEIRO FILHO, 2019).

Ainda sobre energia de interação, outro princípio que foi destaque, no contexto das entrevistas, está relacionado a magnitude das interações dispersivas, consideradas fracas, *“ele tem que entender o contexto todo. Porque, lógico, uma única interação dispersiva é muito fraca, mas se você puser  $10^6$ , certo?”* (P5). O princípio a ser considerado, está relacionado com o caráter aditivo das interações dispersivas, que proporciona um aumento da intensidade na energia desse tipo de interação, caracterizada como fraca (GOTTSCHALK; VENKATARAMAN, 2014).

É essencial que no processo de ensino e aprendizagem das interações intermoleculares, fique evidente, que a principal diferença entre ligações/interações está na energia envolvida, *“ligação iônica que é acima de 100 kJ/mol, de uma ligação sigma 70 kJ/mol, de uma ligação de hidrogênio que tem 25 kJ/mol. Qual a diferença de uma pra outra? É a energia, basicamente é a energia”* (P6). Fundamentalmente, tanto as ligações químicas, quanto as forças intermoleculares são interações eletrostáticas, com distintas energias de interação/ligação (RIVERA-RIVERA *et al.*, 2017).

Existem princípios que podem ser interpretados também, como propostas de como organizar, a abordagem do tema dentro do conhecimento químico, de uma forma mais ampla e que se estende a demais conteúdos, “*o curso inteiro mostrando para a pessoa que ela tem que fazer um jogo o tempo todo entre teoria, experimento, simulação*” (P7). O estudo de conteúdos de química, sobretudo as interações intermoleculares, pode ser facilitado, com o uso de conceitos teóricos, atividades experimentais e técnicas de simulação, que proporcione uma visão completa dos universos submicroscópico e macroscópico dos fenômenos (BURKHOLDER; PURSER; COLE, 2008).

Por mais que, repetidamente, foi retratado no presente trabalho, que as interações intermoleculares são fundamentais na explicação de propriedades físico-químicas e diversos fenômenos, porém, é essencial que tal aspecto seja também elencado, como um princípio no contexto do tema, “*é o entendimento das interações intermoleculares que fornece a base molecular pra você entender qualquer sistema aplicado, quer seja uma doença, um fármaco, processos de biosseparação, etc*” (P8).

Pode-se considerar, que um dos objetivos do trabalho está centrado em verificar, o que é fundamental que um químico saiba sobre as interações intermoleculares, e isso, não necessariamente, deve estar associado a um momento específico e único, “*eu não sou contra repetição, claro, moderada né. Eu acho que você introduzir os conceitos mais de uma vez em diferentes graus de complexidade faz parte do aprendizado*” (P9). O excerto em destaque representa mais um princípio, que mostra a importância de os conteúdos conceituais sobre as interações intermoleculares serem estudados de maneira explícita ou implícita, com diferentes níveis de complexidade ao longo da graduação em química (JUNQUEIRA; MAXIMIANO, 2020).

E por fim, ainda que de forma involuntária, as propriedades sejam pensadas, a partir de uma molécula isolada, é fundamental, ter a noção estatística do número de moléculas que constituem as substâncias, “*um problema conceitual crítico em relação ao tema é o químico pensar em propriedades de uma molécula isolada, calculam-se tais propriedades, mas experimentalmente não se trabalha com uma molécula*” (P10). Essa característica também é muito comum no ensino do tema, uma vez que, mesmo em livros didáticos, as interações são representadas, muitas vezes, em pares de moléculas interagindo, favorecendo a atribuição de propriedades macroscópicas a átomos e moléculas (POZO; CRESPO, 2009).

No (quadro 10) foram elencados os princípios que foram selecionados e que atravessam o conhecimento químico dedicado ao estudo das interações intermoleculares.

Quadro 10 - Principais princípios presentes que emergem da análise das entrevistas.

<b>Princípios</b>
<i>A importância das interações intermoleculares pode ser explicada pela constante presença do tema por todo o conhecimento químico</i>
<i>A interpretação dos fenômenos e propriedades pelos químicos deve ser realizada em uma perspectiva atômico-molecular</i>
<i>A unificação das Interações Intermoleculares é fundamental para o reconhecimento das contribuições de cada tipo de interação em dados sistemas moleculares</i>
<i>É essencial a diferenciação conceitual entre molécula e substância para a compreensão do universo submicroscópico e estatístico das interações intermoleculares</i>
<i>É necessário o entendimento de que a ligação de hidrogênio é uma composição de diferentes forças interativas</i>
<i>O caráter aditivo das interações dispersivas deve ser assimilado pelos químicos para a compreensão da contribuição dessas interações em todas as substâncias</i>
<i>Considerando que todas são atrações/repulsões eletrostáticas, a diferença básica entre ligações químicas e interações não covalentes está na energia envolvida em tais atrações/repulsões</i>
<i>Uma alternativa que pode contemplar os princípios elencados aqui, é uma abordagem do tema interações intermoleculares, com base no tripé teoria, prática e simulação</i>
<i>As Interações intermoleculares fornecem a base molecular para o entendimento de qualquer sistema aplicado.</i>
<i>É fundamental a compreensão de que a Experimentação em Química não se realiza efetivamente a partir de moléculas isoladas</i>

Fonte: autoria própria.

Sobre a categoria (iii), que apresenta as principais ideias que um químico deva compreender sobre o tema. Um dos pesquisadores enfatizou o cuidado em não estabelecer conexões reducionistas, como pode ser observado no trecho abaixo:

...metade da turma, falam o mesmo absurdo que eles aprendem no colegial, que a água dissolve água e que óleo dissolve óleo, falam isso cara...(P4)

O aspecto empirista “semelhante dissolve semelhante” e relações indutivas entre parâmetros moleculares e propriedades físico-químicas, assim como relacionar o tamanho, polaridade ou tipo de interação com o ponto de fusão, são equívocos comuns do processo de ensino e aprendizagem do tema.

A magnitude da ligação de hidrogênio é outro aspecto que, segundo os professores entrevistados, precisa ser mais bem discutido, uma vez que, a ligação de hidrogênio mesmo tendo considerável magnitude em relação às outras interações, isso não significa que a mesma, representa a maior contribuição na energia de interação total (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2010). A fala de P9 mostra, como há

sempre a ideia de que a ligação de hidrogênio é a interação mais forte em um sistema químico.

...NaCl, que tem um cátion positivo e ânion negativo e a água e você tem água-água, qual que é a mais forte? Normalmente ele acha que é água-água porque na cabeça dele a ligação de hidrogênio é muito intensa, mas a coulombica é muito mais forte...(P9)

O pesquisador P9 salienta, que há uma tendência em transformar um conceito em algo mais prático como, por exemplo, escala de intensidade das interações, fica resumida em definir, qual é a interação mais importante.

Em geral, os pesquisadores consideram fundamental, o pleno entendimento sobre as forças dispersivas de London, desde a natureza delas, até o fato de serem atuantes em qualquer sistema de interação molecular, independentemente da polaridade das moléculas envolvidas. A fala de P3 mostra um desses aspectos sobre as forças dispersivas, que também pode ser considerado um princípio, o caráter universal de tais interações.

...O efeito de dispersão. Eu falo para os meus alunos, o efeito de dispersão é que nem gravidade, está lá sempre...(P3)

O uso de equações para representar a energia de interação total é fundamental, na concepção de muitos dos entrevistados, por mostrar as diferentes contribuições para cada tipo de interação, além de explorar visualização das interações de forma unificada como se pode perceber na fala de P2.

...é uma expansão em série, onde cada termo de uma série que você tá dando nome. Se fosse pra dar um passo a mais na química geral que é esse, íon-íon, dipolo-dipolo, é tentar mostrar para o aluno que isso são termos de uma coisa só, unificar...(P2)

A energia de interação total pode ser representada através da equação, que facilita a compreensão dos alunos sobre as diferentes contribuições de energia de cada tipo de interação. O primeiro termo corresponde às interações do tipo dipolo-dipolo, o segundo às forças dispersivas (dipolo induzido-dipolo induzido) e o terceiro às forças de indução (dipolo-dipolo-induzido) (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

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

Equação. Energia de interação atrativa total.

Dois dos pesquisadores defendem a ideia de que uma noção básica de química quântica seria fundamental, para a compreensão efetiva das interações intermoleculares, mas concordam que, se através dos seus conhecimentos, um

egresso de um curso de graduação em química, for capaz de usar e interpretar as equações de energia de interação, é o suficiente para a compreensão do tema, uma vez que, tal equação, destaca a natureza e o caráter aditivo dos diferentes tipos de interação entre as moléculas (JASIEN, 2008).

Quatro docentes acreditam que o uso de ferramentas computacionais de simulação, poderia auxiliar na melhor assimilação desses conhecimentos e, é algo já previsto, a inserção de novas tecnologias nos processos de ensino e aprendizagem.

...eu tenho a impressão que técnicas talvez de simulações computacionais vão ficar cada vez mais e mais importantes, tanto a nível tecnológico quanto científico...(P1)

...os modelos não estão errados, os modelos só precisam agora ser usados de maneira mais aprofundada. Como que você faz esse salto? Então esse salto geralmente vem por simulação, porque você não consegue, no laboratório experimental, testar esses modelos de livro didático...(P7)

A maior parte dos sujeitos da pesquisa, julga fundamental, que um químico visualize as interações intermoleculares de forma unificada, sempre considerando as contribuições energéticas de cada tipo de interação. O instrumento de ensino mais viável para tal interpretação, principalmente em uma perspectiva qualitativa, seria a utilização de equações, como a de energia de interação total, que mostra todas as interações envolvidas para um par de moléculas iguais e dipolares (Equação 1).

Por fim, alguns excertos das entrevistas com os pesquisadores, classificados como princípios, dentro do contexto do tema interações intermoleculares. O primeiro relacionado à forma como o concluinte de graduação em química deve visualizar/interpretar os fenômenos macroscópicos e os outros dois associados ao caráter aditivo e universal das forças dispersivas.

...eu acho que o químico tem que ter uma **interpretação mais molecular e, até atômica dos fenômenos**, pode ser fenomenológica, não precisa necessariamente ser muito quantitativa...(P1)

...o **efeito de dispersão**. O efeito de dispersão é que nem gravidade, **está lá sempre**...(P3)

... ter noção de que é, por exemplo, **forças dispersivas**, apesar de fracas, elas **no coletivo** são fortes...(P5)

### **6.3.3 O tema nas disciplinas ministradas pelos especialistas**

Novamente em função das características proporcionadas pela entrevista semiestruturada, cada especialista tratou do tema nas disciplinas ministradas na graduação, em momentos diferentes. Alguns dos entrevistados falaram desse aspecto, sem serem questionados diretamente, abordando tal tópico, no contexto geral da entrevista e outros responderam objetivamente às questões sobre como as interações intermoleculares são ensinadas em tais disciplinas.

E esse caráter aberto da questão, oportuniza aos especialistas a apresentarem, desde concepções de assuntos correlatos as disciplinas da graduação em química, até experiências pessoais com tema, seja como professor, orientador, pesquisador ou aluno.

As categorias sobre o tema nas disciplinas ministradas foram divididas, com o intuito de compreender melhor as concepções de todos os especialistas em:

- i) Ensino das interações intermoleculares nas disciplinas de graduação em química;
- ii) Fenômeno ou processo considerado ideal para discussão do tema na graduação.

Lembrando que o item (ii) foi abordado anteriormente de forma breve, onde os principais fenômenos foram dispostos em uma nuvem de palavras e em um quadro com o principal fenômeno citado por cada especialista. Nesse sentido, aqui os fenômenos não foram meramente citados, mas apresentados de uma forma, que propicie a compreensão das relações conceituais acerca dos fenômenos que emergiram das entrevistas.

O especialista P1 considera fundamental, que no processo de ensino seja feita uma interligação entre um assunto abordado numa determinada disciplina e outros tópicos nas demais disciplinas da graduação, é essencial que se tenha conexões entre as disciplinas.

Segundo o entrevistado, a interdisciplinaridade é importante no sentido de as disciplinas não estarem muito separadas no processo de ensino e aprendizagem, quanto menor a preocupação com a interdisciplinaridade, o aprendizado dos conceitos de Química é prejudicado.

Para P1, a forma como as disciplinas são tratadas pode influenciar no caráter formativo do aluno, como pode ser observado nesse trecho.



...eu acho que a gente forma um químico mais completo se você consegue fazer com que as disciplinas falem melhor com as outras, de tal forma que o que o aluno aprendeu numa disciplina sirva às outras e resgate aquilo na memória dele... (P1)

É interessante pontuar, que existe essa percepção em relação ao próprio tema interações intermoleculares, uma vez que ele é abordado nas diferentes disciplinas do curso, na maior parte das vezes, implicitamente.

Conforme o especialista P1, o próprio aluno incorpora essa ideia de fronteira entre as disciplinas e lembra, que ao abordar conceitos de físico-química em uma disciplina de bioquímica, os alunos não esperavam que tais conceitos fossem vistos novamente, como se determinado assunto, só pudesse ser trabalhado na disciplina específica.

Sobre o tema nas disciplinas, o especialista afirma que na disciplina de biologia estrutural é realizada uma revisão das interações intermoleculares nas primeiras aulas, sobretudo porque o tema aparece ao longo da disciplina.

P1 recorda, que o tema também é explorado na disciplina de introdução à bioquímica, ao explicar estruturas de proteínas, além do conceito de solubilidade, que é fortemente relacionado com as interações intermoleculares e é fundamental em bioquímica.

Verificar que as interações de alguma forma estão inseridas no conteúdo das disciplinas ministradas pelo especialista, tanto biologia estrutural quanto a bioquímica, demonstram a importância do tema em diferentes áreas, em especial correlatas à biologia.

A maioria das publicações da área de ensino de química, destaca nas suas introduções, o papel central das interações intermoleculares em reações químicas, processos de separação, desenvolvimento de novos materiais, também no reconhecimento molecular em processos biológicos e para o entendimento de sistemas bioquímicos (MURTHY, 2006).

Sobre um fenômeno apropriado para o ensino das interações intermoleculares, o especialista P1 considera que o efeito hidrofóbico pode ser interessante para a discussão do tema, pois relacionam propriedades da água, solubilidade de alguns compostos orgânicos e conceitos de entropia.

Outro fenômeno importante na opinião do especialista é o reconhecimento molecular, que é bastante dependente das interações intermoleculares e pode ser explorado para melhor compreensão do tema.

Realmente, o reconhecimento molecular em sistemas biológicos, está baseado na existência de interações intermoleculares específicas entre duas estruturas moleculares, que seria o ligante e o seu alvo biorreceptor, geralmente proteínas. Desde o modelo chave-fechadura, estudos continuam sendo feitos para se identificar e compreender tais interações (SANT'ANNA *et al.*, 2020)

É importante ressaltar, que em outra ocasião da entrevista, P1 cita novamente o efeito hidrofóbico e defende que os químicos deveriam ter uma interpretação mais molecular de tal fenômeno, não se ater a explicações simples, por exemplo, de que água e óleo não se misturam, apenas devido as polaridades distintas.

De acordo com Guimaraes (2012), quando as moléculas de água são liberadas de sítios ativos de proteína, especialmente de regiões mais hidrofóbicas, resulta em grande aumento de entalpia e entropia, todo esse processo é chamado de efeito hidrofóbico.

Durante a explicação mais detalhada, dada ao especialista P2, sobre do que seria abordado na entrevista, especialmente, verificar como o tema está sendo trabalhado e sua importância na graduação. O entrevistado recorda, que o tema passa por várias disciplinas do curso, mas ressalta que não há um momento dedicado ao estudo das interações moleculares.

O especialista afirma que a disciplina mais recente ministrada por ele na graduação, foi a de química quântica, que segundo ele, é a química quântica da molécula isolada. Para P2, falta tempo até para a compreensão sobre a própria molécula isolada e traz concepções sobre qual seria o próximo passo, no contexto da disciplina.

De acordo com o entrevistado, após o término dessa disciplina, que apresenta um lado mais conceitual em compreender os fundamentos, o próximo passo na química, e talvez, até mais interessante para a formação, seria uma introdução aos cálculos quânticos e isso seria possível, através de uma disciplina de química quântica computacional, que continua sendo a molécula isolada.

Desse modo, pode-se observar e tal perspectiva é confirmada pelo especialista, em relação ao fato de que pode haver, um aprofundamento em química quântica, sem adentrar no tema interações intermoleculares. De fato, é comum nas pesquisas sobre estudos químico-quântico computacionais, que o modelo utilizado seja de uma molécula isolada no vácuo (GALEMBECK *et al.*, 2008).

Segundo Leal *et al.* (2010) atualmente os cálculos químico-quânticos são considerados fundamentais em laboratórios acadêmicos, assim, os métodos de química computacional conseguem oferecer resultados sobre parâmetros moleculares e propriedades, com precisão oriundos de abordagens experimentais ou teóricas.

Esse avanço em relação à aprendizagem de cálculos quânticos, sugerido pelo especialista, pode contribuir para a compreensão de como são obtidos os parâmetros moleculares, através de tais cálculos e propiciando uma perspectiva quantitativa, ao invés de meramente qualitativa, de propriedades e parâmetros moleculares.

Na opinião do especialista P2, a disciplina mais adequada para a abordagem das interações intermoleculares seria a físico-química III, visto que em físico-química I, é a termodinâmica, a II é a estrutura e III faz o grande enlace. E sugere, que talvez o melhor momento para o estudo das interações, poderia ser antes dos conceitos de interfaces ou até mesmo introduzir o tema entre termodinâmica estatística e interfaces.

Para o entrevistado, a alternativa para uma abordagem mais detalhada das interações intermoleculares, como também, viável, seria uma disciplina optativa sobre líquidos, além de mais tempo para tratar do tema, possibilitaria um conhecimento mais abrangente sobre líquidos, uma vez que tal conteúdo, é igualmente negligenciado nos livros-texto.

Dois aspectos destacados na entrevista com P2, foram a importância dos estudos sobre líquidos, em especial, por ser o estado físico em que se encontram a maior parte das substâncias nas experimentações de laboratório e a relevância dos conceitos de química quântica para a compreensão da natureza das interações.

Segundo o especialista, os conceitos de química quântica são essenciais para o tema e eles estão presentes desde a química geral, disciplina que traduz os resultados da quântica numa linguagem mais apropriada, mas são diversos conceitos justificados pela quântica.

Embora o ensino de quântica seja desafiador devido à quantidade e complexidade dos cálculos, a inserção da computação em química quântica é apropriada para o entendimento de diversos assuntos do conhecimento químico, além de ser atrativa para os estudantes (LEAL *et al.*, 2010).

E em relação a um fenômeno interessante para abordar o tema, inicialmente, o especialista P2 indica a mistura de líquidos, sem dar muitos detalhes, mas defende

que os próprios fenômenos presentes em química orgânica, físico-química, analítica, etc., devem ser explorados do ponto de vista das interações intermoleculares.

E em seguida, alguns desses fenômenos são elencados por P2, como os diagramas de fases, tensão superficial e capilaridade, além dos fenômenos nas diferentes disciplinas.

Essa mistura de líquidos pode ser subentendida por misturas de água com diferentes tipos de álcool, mencionadas pelo especialista ao abordar a magnitude das ligações de hidrogênio, como um sistema modelo para discussões dessas interações.

Em misturas de álcool e água, o aumento da cadeia carbônica dos álcoois faz com que a solubilidade diminua. Esse aumento da cadeia, que é hidrofóbica tende a ser a parte dominante da molécula e a substância se torna menos solúvel, ficando com características mais próximas a de um hidrocarboneto. Diante disso, a formação de ligações de hidrogênio entre as moléculas de álcool e as moléculas de água, não consegue compensar as ligações de hidrogênio entre as moléculas de água, que precisam ser rompidas para ocorrer o processo de dissolução (MARTINS; LOPES; De ANDRADE, 2013).

O especialista P3 inicia comentando as diferentes disciplinas ministradas por ele na graduação, mas dentre essas, as interações intermoleculares foram abordadas pelo mesmo de forma explícita em físico-química I.

Segundo o entrevistado, as interações são discutidas no tópico sobre gases, para entender as curvas que apresentam variações ou não, em função da temperatura. Lembra que a volatilidade depende do entendimento dessas interações e, na termodinâmica, o tema está presente o tempo todo.

Analisando os conhecimentos químicos em um curso de ensino superior de química, P3 considera que o tema está disseminado pelas disciplinas, mesmo que de forma implícita em algumas. Em muitas disciplinas, o especialista vê as interações intermoleculares, como fundamentais para fazer a ponte do macroscópico para o submicroscópico.

Muitas investigações exibem que o entendimento do microscópico e também do simbólico, são consideradas difíceis para os estudantes, em função da abstração, além de não utilizarem relações apropriadas entre os níveis macroscópico e microscópico (POZO, 2001; SANTOS; GRECA, 2005).

De acordo com P3, isso fica bem evidente na disciplina físico-química III, onde as poucas aulas de estatística, contribuem para esse entendimento, de como as interações estão implícitas nos fenômenos macroscópicos.

As transformações físicas de substâncias puras e misturas são fenômenos que podem ser interpretados, através das interações intermoleculares e a intensidade das interações, está diretamente vinculada ao comportamento das moléculas constituintes desses sistemas.

Por conseguinte, a entalpia de vaporização e, em geral, a termodinâmica está relacionada às interações entre as moléculas, no entanto, nas misturas devem-se considerar os fatores entrópicos e entálpicos, aumentando a complexidade do sistema.

É importante observar que durante suas concepções, o especialista P3, mesmo não tendo como propósito adotá-los, como fenômenos fundamentais para tratar do tema, vários foram, por ele, mencionados: liquefação de gases, congelamento da água de rios e lagos, interações em polímeros naturais, etc.

De acordo com o especialista P4, ele ministra disciplinas em vários níveis e a forma como aborda o tema, segundo o entrevistado, se conecta mais com o entendimento dele mesmo, sua visão e, também, com sua pesquisa. Tanto para os cursos de bioquímica, biologia, quanto para a química, sempre a primeira aula é sobre forças intermoleculares.

Apesar de ser explorado em outra parte do texto, resumidamente o método consiste em comparar os gráficos de energia de interação em função das distâncias intermoleculares para dímeros de moléculas com distintas polaridades. Além da análise das forças dominantes na distância de equilíbrio e em regiões próximas e distantes desse equilíbrio.

Sobre a disciplina apropriada para abordagem das interações intermoleculares na graduação em química, o especialista P4 considera que físico-química é a mais indicada, mas não sugere um momento específico.

Relata, no mais, que como recebe orientandos de diferentes áreas, sempre recomenda o estudo de físico-química e a compreensão de conceitos de termodinâmica e cinética.

O especialista ressalta que em suas aulas, em especial nas aulas introdutórias, é frequente e necessário o enfoque nas interações intermoleculares, destaca que procura ir construindo e explicando os conceitos por meio das interações

mais fracas, até as mais intensas. Além de utilizar alguns recursos de simulação computacional, para enfatizar e calcular alguns parâmetros importantes para o tema.

Realmente esse tipo de abordagem, que analisa a energia de interação para diferentes distâncias intermoleculares de dímeros, é muito interessante para tratar das interações intermoleculares, principalmente, pelos diferentes tipos de interações serem vistos de forma unificada e, a correlação feita entre as magnitudes dessas interações, alteradas, dependendo das moléculas envolvidas e distâncias intermoleculares.

Na pesquisa bibliográfica deste trabalho, dois artigos utilizaram tal tipo de abordagem, essencialmente, o primeiro defendia que não há diferenças consideráveis entre as ligações químicas e entre ligações e as interações intermoleculares, sobretudo no formato da curva do potencial de Lennard-Jones de dímeros, que representavam as distintas ligações e interações existentes (RIVERA-RIVERA, 2017).

E o segundo era referente a um trabalho que explorava a decomposição de energia de interação de diferentes dímeros, por meio de métodos quânticos, com destaque a contribuição dominante em cada sistema molecular (KOLLMAN, 1977).

Sobre um fenômeno que tem a capacidade de envolver os principais conceitos relacionados às interações intermoleculares, o especialista P4 comenta durante a entrevista sobre o efeito hidrofóbico e outros fenômenos envolvendo solubilidade, como centrais na discussão do tema.

Segundo o entrevistado, no efeito hidrofóbico há um balanço das forças intermoleculares, com a contribuição entálpica, que ajuda a explicar o fato da água interagir com água, não porque água e metano, por exemplo, não tenham uma interação estabilizante, mas, também pelos aspectos relacionados à contribuição entrópica do fenômeno.

P4 destaca, que chama a atenção para as interações mais básicas, eletrostáticas e de van der Waals, que estão presentes em solvatação aquosa, explicando termodinamicamente, assim como o efeito hidrofóbico, em termos de entalpia e entropia.

O especialista P5 relata que já ministrou por diversas vezes as disciplinas de físico-química teórica e físico-química experimental e afirma que o tema é muito abordado em tais disciplinas e detalha, alguns experimentos sobre tensão superficial, que sempre utiliza para explorar conceitos de interações intermoleculares.

E considera que o fenômeno considerado adequado para discutir os conceitos fundamentais sobre as interações intermoleculares, está relacionado com esses tipos de experimentos. As medidas de tensão superficial em amostras de misturas líquidas, segundo P5, podem proporcionar grandes discussões sobre o tema.

Na prática, esse tipo de experimento de misturas de água, álcool e a inserção de tensoativos, além de ajudar na compreensão do processo de miscilização, há muita ênfase em conceitos importantes do tema.

O especialista P6 considera, que as maiores discussões em relação às interações intermoleculares, muitas vezes, são limitadas ao contexto da disciplina de química geral.

O entrevistado, após explicar alguns dos conceitos essenciais, para serem mais bem compreendidos e auxiliar no entendimento pleno do tema, sugere que, em termos de química geral, dois tópicos poderiam ser mais bem tratados, a Teoria da Ligação de Valência e o Potencial, e Potencial Eletrostático Molecular, já o Potencial de Lennard-Jones, seria mais apropriado, junto aos conteúdos de físico-química.

Para P6, seria utópico, mas a criação de uma disciplina, que disponibilizasse mais tempo para discussão dessas questões, seria ideal. Nesse sentido, o especialista considera a disciplina de química geral, como a mais importante de um curso de graduação em química, sobretudo, as explicações dos fenômenos, que devem ser feitas, com base em química básica.

Mais para o final da entrevista, o especialista menciona que essa disciplina poderia ser denominada de “*estrutura da matéria*” e oferecida, como uma disciplina optativa. Essencialmente, explorar mais, todos esses elementos do tema, do ponto de vista químico, a composição da matéria, em uma perspectiva intermolecular e eletrostática.

O especialista explica sobre uma aplicação, que pode levantar diversos conceitos das interações intermoleculares, os sistemas de interação fármaco-receptor, que trazem dentro de tais sistemas, outros conceitos, como lipofilicidade e partição etanol-água, que são regidos pelas interações.

Numa perspectiva qualitativa, a afinidade e especificidade do fármaco-sítio receptor, são definidas pelas interações intermoleculares, que podem ser representadas pelas forças eletrostáticas, tais como ligações de hidrogênio, dipolo-dipolo, íon-dipolo, ligações covalentes e interações hidrofóbicas (BARREIRO; FRAGA, 2015).

Já o especialista P7, ministra desde disciplinas de história da química, até as disciplinas de físico-química, termodinâmica, espectroscopia e química quântica. Conforme o entrevistado, às vezes, é responsável por química geral e mais comumente, a disciplina de físico-química, afirma que as interações intermoleculares são a espinha dorsal de qualquer disciplina dessas, o tempo todo, é interação.

Em diversos momentos da entrevista, o especialista discute alguns aspectos envolvendo as disciplinas, por exemplo, a base teórica da química, segundo P7, está nas disciplinas que tratam das leis da termodinâmica e dos postulados da mecânica quântica.

Outro apontamento feito pelo entrevistado, que, na opinião dele, poderia representar um salto de qualidade, é reunir os modelos que estão presentes em química geral e outras disciplinas e aplicá-los em simulações computacionais, através de disciplinas denominadas avançadas, por exemplo, cálculos quânticos, realizados através de modelos de análise de potenciais eletrostáticos, isso poderia facilitar a interpretação de mecanismos de reações, por exemplo, estudados em química orgânica.

Um exemplo prático apontado por P7, para abordar os conceitos relacionados às interações intermoleculares, são as propriedades de excesso em misturas de água e álcool, pois há evidências macroscópicas, consideravelmente observáveis, como a diminuição de volume da mistura e o calor liberado.

Os volumes parciais molares dos componentes de uma mistura, variam de acordo com a composição, considerando que o meio se altera, dado que as moléculas de determinada substância passam a integrar e interagir com outra substância, antes pura (ATKINS, 1999).

Essa mudança do ambiente, resulta numa variação das interações intermoleculares, que atuam entre as moléculas, sendo esta, a responsável pela variação das propriedades extensivas de uma solução (BISPO *et al.*, 2014)

De acordo com o entrevistado, a explicação do calor está relacionada à diminuição do número de ligações de hidrogênio, após a mistura e a redução de volume, que ocorre em função do empacotamento molecular, aspectos que seriam bem demonstrados por simulação. P7 reitera, que seriam aspectos que poderiam ser utilizados, com estudantes que não estão compreendendo o tema, as propriedades de excesso seria um caminho.



A entrevista com P8, revela que, na concepção do especialista, os conceitos básicos sobre as interações intermoleculares devem ser abordados na disciplina de química geral, desde os tipos de interações, até a identificação da interação específica para cada estrutura molecular e, em um segundo momento do curso, numa disciplina mais específica, como físico-química, seria mais apropriado um nível de detalhamento maior.

Sobre uma disciplina específica para tratar das interações intermoleculares, o entrevistado considera que, seria interessante, pelo fato de ter mais tempo para trabalhar todas as questões pertinentes ao tema. Para P8, a fundamentação teórica que pode ser proporcionada, permitiria ao estudante passar por qualquer área das ciências moleculares de uma forma tranquila, adicionando apenas as especificidades e detalhes de cada aplicação, dependendo da área.

As disciplinas mais ministradas recentemente pelo especialista P8, foram, segundo ele, as disciplinas de físico-química e físico-química de coloides. Ao ser questionado sobre, como as interações intermoleculares são abordadas nessas disciplinas, alguns detalhes foram apresentados.

O especialista P8 pontua, que em aulas práticas de concentração micelar crítica (cmc), o tema é muito abordado, já em físico-química tradicional, o entrevistado afirma que procura descrever, por exemplo, a diferença de energia interna e entalpia, com base nas interações, sem o uso de equações.

De acordo com o especialista, na físico-química de coloides, as equações são apresentadas e os conceitos são mais detalhados, tudo isso relacionado às teorias de estabilidade coloidal. Logo, na físico-química continua sendo uma noção básica, como em química geral e, na físico-química de coloides, tem um viés mais tecnológico, que exige mais essas expressões matemáticas e, sempre mostrando as interações de forma unificada e dependendo da turma, P8 relata que decide se faz uma introdução às forças mesoscópicas.

Sobre um fenômeno para discussão do tema, P8 menciona que ótimos exemplos para tratar e se aprofundar sobre os conceitos das interações intermoleculares são os fenômenos de estabilidade coloidal e concentração micelar crítica (cmc).

Concentração micelar crítica (CMC), que está relacionada à associação espontânea, via interações intermoleculares, em solução aquosa de tensoativos, estes, formados por moléculas anfifílicas, que possuem regiões estruturais, hidrofílica

e hidrofóbica. A partir da CMC, grandes agregados moleculares são formados pelas moléculas do tensoativo (MORAES; REZENDE, 2004).

Para P8, em tais fenômenos podem ser explorados a variação de tamanho, o efeito de cadeias e a parte experimental, pois ajuda a demonstrar o que está acontecendo nesses sistemas moleculares. A própria utilização de surfactantes de tamanhos diferentes pode mostrar esses efeitos de cadeia e a contribuição das forças atrativas de van der Waals.

O especialista P9 relata que os conceitos mais básicos sobre o tema devem estar na disciplina de química geral e informa que, na maior parte das vezes que ministrou tal disciplina, foi para não químicos, por exemplo, em cursos de física e engenharias. Nesse contexto, P9 menciona que procurava falar das ligações químicas, dos conceitos de polaridade, geometria e no fim da disciplina, levantava algumas discussões sobre fenômenos envolvendo as interações.

Recentemente, o entrevistado tem ministrado termodinâmica, tanto teórica quanto prática, mais frequentemente, práticas em laboratório. Destaca-se que, em experimentos de diagramas de fases, vários conceitos de interações são discutidos, sempre embasados nos experimentos, assim como a parte de coloides e surfactantes, que é ministrada por ele, tanto teoria quanto a prática.

O especialista P9 chama a atenção para uma disciplina denominada de “*química aplicada*”, que é ministrada por mais de um professor e é oferecida no último ano de graduação em química da universidade em que atua. Apesar de não considerar um bom nome para a disciplina, pois, para o entrevistado, toda química é aplicada, a ideia é trabalhar fenômenos do cotidiano, interpretados pela química.

De acordo com o entrevistado, nessa disciplina, fenômenos de como se dá o funcionamento de surfactantes, umectantes, modificadores de superfície, polímeros e suas características de absorção e resistência mecânica, tudo isso é explicado em uma perspectiva molecular.

Essa percepção em relação à aplicabilidade da química, é algo que fica evidente durante a entrevista, conseqüentemente, vários exemplos e fenômenos emergem das concepções do especialista P9. A priori, foi apresentada a resposta direta a tal questionamento, sobre fenômenos ou processos ideais para discutir as interações intermoleculares.

O especialista P9 considera que a questão da miscibilidade de água e óleo, é um caso muito bom de ser analisado e é essencial para explicar, por exemplo, o efeito

surfactante. Basicamente, o entrevistado descreve haver interações atrativas entre as moléculas de água e óleo, mas são fracas e, tais substâncias, não se misturam por uma questão de entropia e não de entalpia.

Outro fenômeno fundamental é a tensão superficial de substâncias líquidas, para o entrevistado, a tensão superficial de qualquer líquido na interface, tem menos interações, porque uma parte dos vizinhos dela, é o ar, logo, as moléculas do líquido interagem muito mais com as moléculas internas, conseqüentemente, a tensão superficial é alta, ou seja, as interações são muito importantes neste fenômeno.

Outros fenômenos citados pelo especialista como interessantes para abordagem das interações intermoleculares foram os fenômenos de superfície e surfactantes. P9 detalha também, como fenômeno propício para discutir o tema, a molhabilidade, que explica, essencialmente, porque uma gota de água em cima do vidro, ela molha e em cima do plástico polietileno, não molha, ou melhor, não espalha e tal explicação está nos conceitos referentes às interações intermoleculares.

O especialista comenta também, algumas aplicações relacionadas ao cotidiano, como o uso de anti-embaçantes, fraldas descartáveis, a última com explicações mais detalhadas. De acordo com P9, as fraldas são constituídas por poliacrilato, que tem cargas e a água interage melhor, em relação as hidroxilas presentes nas fraldas de pano, o fato de ser absorvente, também está relacionado à reticulação do polímero, P9 explica, que o gel reticulado influencia na questão volumétrica e interação água-absorvente.

O especialista P10 afirma que o desafio em uma disciplina de química geral é a introdução, de maneira empírica, de várias propriedades que o sujeito conhece do dia a dia e que estão ligadas às interações intermoleculares.

O entrevistado destaca que desde a disciplina de química geral deve ser enfatizado, que se pensa na molécula isolada, para sistematizar, por exemplo, conceitos como eletronegatividade e força de ligação. Mas as experiências são realizadas com agregados moleculares gigantescos e as interações de uma molécula com outras, não devem ser negligenciadas.

Outro comentário relacionado às disciplinas na graduação em química realizado pelo especialista P10, com enfoque nos livros didáticos, segundo ele, é perceptível a desproporção de conteúdo dos livros de química geral, físico-química e outros, quando abordam as interações clássicas intramoleculares e depois, somente um pequeno apêndice de forças intermoleculares.

Apesar de vários fenômenos relacionados ao tema, que emergiram durante a entrevista com P10, quando questionado diretamente sobre um, que seria interessante para discutir as interações intermoleculares, o entrevistado afirma que a liquefação dos gases, por ser, o que ele denomina de divisor de águas em relação ao tema.

Outros fenômenos mencionados pelo especialista, como fundamentais para tratar do tema, foram os pontos de ebulição de líquidos, fenômenos de solvatação, a própria solubilidade, desnaturação de proteínas e fenômenos de cristalização.

A última entrevista foi realizada com o especialista P11 e devido à abordagem diferente, já explicada na metodologia, as respostas ao questionário foram dadas de forma bem direta. De início, P11 afirma, que as disciplinas de química quântica e termodinâmica estatística, foram as que ele mais ministrou ao longo de sua carreira.

Em relação a essas disciplinas, o especialista explica, que em quântica o tema não era abordado, mas em termodinâmica estatística, as principais ideias sobre as interações intermoleculares eram apresentadas, também, as equações e os cálculos são efetuados, pelo menos o segundo coeficiente do virial para um gás real, utilizando modelos simples, como esfera rígida e poço quadrado.

Sobre um bom fenômeno ou processo para o aprendizado das interações intermoleculares, o especialista P11 lembra que a compreensão do processo de liquefação de gases nobres, pode ser explorada para explicar o tema, além das propriedades dos líquidos iônicos.

Em síntese, pode-se afirmar que os especialistas reconhecem que as interações intermoleculares estão presentes, na maioria das disciplinas de um curso de graduação em química, mesmo já tendo sido demonstrado no presente trabalho, agora não como uma percepção, mas pela experiência dos especialistas em disciplinas ministradas por eles.

Quando o assunto tratado na entrevista foi sobre questões envolvendo as disciplinas da graduação, os especialistas retratam a importância dos conceitos do tema em diversas disciplinas, de química aplicada à bioquímica.

De modo geral, a maior parte dos entrevistados considera que as principais disciplinas para a abordagem do tema são as de química geral e físico-química. A primeira, como uma forma de apresentar os tipos de interações e as diferenças quanto suas magnitudes e outras características e, na físico-química, seria mais propícia para

um aprofundamento, com base na explicação de fenômenos e introdução de conceitos estatísticos, entrópicos e quântico-computacionais.

Algumas especificidades não foram compartilhadas por todos os entrevistados, porém, cabe ressaltar, que alguns dos especialistas ressaltaram, que a criação de uma disciplina, mesmo que optativa, seria ideal para tratar do tema com mais tempo e importante para o curso de química.

A forma como o tema era abordado foi uma questão em que alguns não deram tantos detalhes, mas pode-se inferir, que grande parte apresenta o tema de forma tradicional, seguindo as tendências dos livros de química geral, com as informações básicas dos diferentes tipos de interações e, todos consideram fundamental, a ênfase na tabela presente em tais livros-texto, que reúne as interações e suas respectivas magnitudes.

Merece destaque, que alguns dos especialistas apresentam abordagens incomuns, com uma perspectiva mais molecular e que foram detalhadas no presente trabalho em outra oportunidade, mesclando o uso do potencial de Lennard-Jones, equações para o cálculo de energia de interação em função da distância intermolecular, utilizando parâmetros moleculares para dímeros e a introdução de métodos de simulação computacional via cálculos quânticos, tudo isso, proporcionando uma visão mais unificada das interações.

Um último destaque que foi abordado de forma explícita por um dos especialistas, foi sobre quanto a interdisciplinaridade é fundamental na graduação em química, sobretudo no estudo desse tema.

Em relação aos fenômenos ou processos que são considerados relevantes para a abordagem das interações intermoleculares, algumas propriedades físicas são citadas, como liquefação, congelamento e pontos de ebulição. Mas os fenômenos mais indicados pelos entrevistados são os que envolvem substâncias líquidas.

Misturas água-álcool, água-óleo, efeito hidrofóbico, solubilidade de compostos em água, surfactantes, propriedades de excesso, coloides, diagramas de fases, miscilização, tensão superficial, capilaridade, cristalização, molhabilidade e desnaturação de proteínas, foram mencionados pelos entrevistados, alguns detalhando tais processos e outros não. Qualquer um desses fenômenos, quando estudados com profundidade, podem explorar diferentes características das interações intermoleculares, em especial quando as substâncias envolvidas estão no estado líquido.

Em seguida, foram apresentados o (quadro 11) e o mapa conceitual (figura 33), sintetizando as principais ideias levantadas nas entrevistas, sobre as disciplinas na graduação em química e os fenômenos ou processos ideais, para a discussão do tema interações intermoleculares.

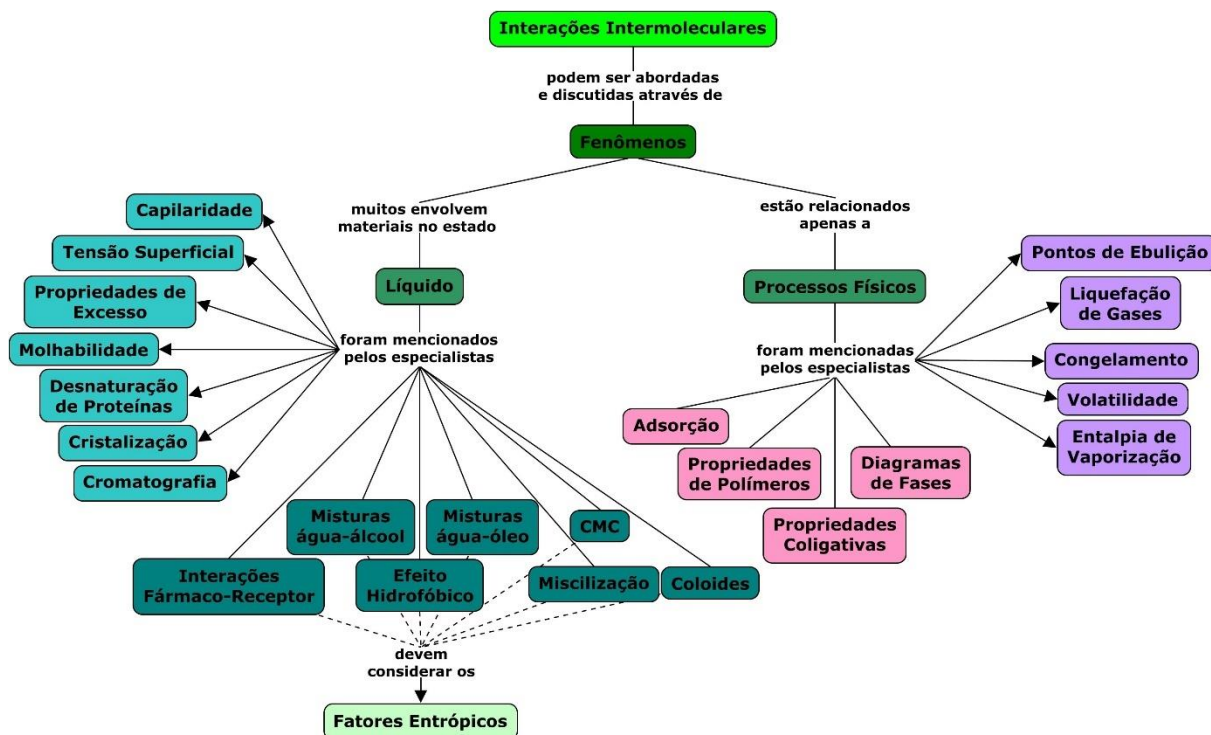
Quadro 11 - Síntese das informações das entrevistas em relação a disciplinas.

Presença do tema* (disciplinas)	Recomendadas para o tema	Tipos de Abordagens	Conceitos relacionados
Química Geral Físico-Química Biologia Estrutural Bioquímica Química Aplicada Coloides Termodinâmica Ciências Moleculares Espectroscopia Química Orgânica Química Analítica História da Química	Química Geral Físico-Química Disciplina Utópica (optativa)	Tradicional (ênfase nos diferentes tipos de interações e suas magnitudes)  Molecular (ênfase na unificação das interações via equações e simulações)	Interações intermoleculares molécula isolada, cálculos quânticos, interdisciplinaridade, simulação, ensino, aprendizagem, líquidos, interfaces, laboratório, experimentação, macroscópico, microscópico, entropia, entalpia, energia de interação, distância, eletronegatividade, força de ligação, polaridade, geometria, forças mesoscópicas, potencial eletrostático, mecanismo de reação, engenharias, física, equações, interações de van der Waals.

\*Considerando as concepções dos especialistas durante a entrevista completa

Fonte: autoria própria.

Figura 33 - Mapa Conceitual com os fenômenos sugeridos para abordagem das interações intermoleculares por todos os entrevistados.



Fonte: autoria própria.

### 6.3.4 O tema no currículo

No momento final da entrevista, os especialistas foram questionados sobre o currículo de graduação em química, sobretudo suas concepções em relação a como o tema está inserido na grade curricular de um curso superior.

Para o especialista P1, quando se fala em interações intermoleculares, é importante resgatar conceitos, como energia livre de Gibbs, variação de entalpia e variação de entropia. Na opinião do entrevistado, esses tipos de conceitos e tantos outros não são consolidados, uma vez que muitos não são triviais e, é fundamental retomá-los em diferentes disciplinas.

O P1 recorda que no período em que era aluno de graduação, o tema foi abordado em físico-química, no estudo dos gases, com discussão da equação de van der Waals e como interpretá-la. Lembra que, dentro do assunto gases ideais e não ideais, foi necessário interpretar os parâmetros  $a$  e  $b$  da equação de van der Waals.

O especialista menciona que na química geral, as interações intermoleculares podem ser discutidas amplamente, em especial quando o assunto solubilidade é abordado e afirma que o tema é negligenciado durante a graduação.

E quanto a como o currículo deveria ser organizado, P1 considera que as interações intermoleculares, junto a outros conceitos, devem ser mais recorrentes e presentes em diferentes disciplinas, pois são conceitos que perfazem a química em diferentes áreas.

Já o especialista P2 pensa em uma proposta pautada em química quântica, por meio da Teoria da Perturbação e modelos que utilizem cálculos quânticos, para o aprofundamento na natureza das interações intermoleculares. Entretanto, uma proposta que poderia contribuir e ser implementada na disciplina de química geral, poderia ser fundamentada nas interações eletrostáticas.

Para o entrevistado, a utilização da equação de Coulomb, em que as diferentes interações eletrostáticas são representadas, por diferentes termos de uma somatória, onde cada termo, correlaciona cargas e distância intermolecular, contribuem para uma perspectiva mais integrada das interações.

O especialista P3 percebeu, que desde as primeiras disciplinas de química geral, as interações intermoleculares são tratadas explicitamente, segundo P3, o tempo todo se fala em interações. De acordo com o entrevistado, também é uma forma de preparação para físico-química e, de fazer a ponte entre o macroscópico e o submicroscópico.

As concepções do entrevistado P4 sobre o tema foram em grande parte, representadas por detalhes da metodologia utilizada para a abordagem das interações intermoleculares. O especialista reconhece que o enfoque dado ao tema em suas aulas, é consequência de sua formação e área de pesquisa.

O P4 afirma que algo a ser destacado, é ir construindo o tema em etapas, interações menores e explicando os conceitos, depois interações maiores, ligações de hidrogênio e introdução de alguns conceitos de simulação para consolidar.

E em relação ao tema no currículo, o especialista considera que não seria necessária a mudança, mas afirma que a disciplina de físico-química, seria a mais apropriada para abordar o tema, sobretudo com uma boa noção de física como pré-requisito.



O especialista P5 considera que os conceitos já são bem trabalhados da forma como está organizado o currículo atualmente, mas afirma que em algumas disciplinas, o tema pode ser mais bem explorado conceitualmente do que em outras.

Em termos curriculares, o especialista P6 sugere que uma disciplina específica, cujo pré-requisito fosse a própria química geral, seria fundamental para tratar desde a parte eletrostática, as interações intermoleculares, as funções de Lennard-Jones, ligações de hidrogênio, TOM e TLV, em uma perspectiva macroscópica. Tudo isso em uma disciplina, que poderia ser optativa, sem muitos formalismos e abstrações, essencialmente, para o teor informativo.

Já o especialista P7 ressalta que não existem problemas na ementa de química em química geral, por exemplo, a maior dificuldade está em como tal disciplina é ministrada. Segundo o entrevistado, precisa-se padronizar a forma como é ensinado, para que não tenha tantas discrepâncias de professor para professor.

Para o P7, não é uma questão de tirar a liberdade de cátedra, mas padronizar a cátedra, até porque o assunto não muda tão rápido ao longo do tempo, pode-se até adotar outro livro-texto, de tempos em tempos, mudar a bibliografia, por exemplo, mas não há uma necessidade de mudar o conteúdo.

Conforme o especialista, a ciência fundamental não mudou, então, não há motivos para mudar, há motivos para padronizar a forma de ensinar, práticas de ensino mais modernas e atrativas, sem mudanças nos livros-texto. Tais práticas de ensino podem ser pautadas em teoria, prática e introdução de simulação computacional.

O especialista P8 não apresenta tantas concepções relacionadas ao currículo, principalmente, pelo fato de estar ministrando várias disciplinas de química em outros cursos. No entanto, para o P8, a disciplina com mais condições de desenvolvimento dos conceitos de interações intermoleculares é a físico-química.

O entrevistado P9 relata que na universidade em que atua, há duas disciplinas em que as interações intermoleculares são o foco, uma que aborda principalmente as questões de geometria molecular, dentro da inorgânica e outra mais voltada para as aplicações. A primeira que é denominada de *interações químicas*, que é obrigatória a todos os cursos de química, a segunda chamada de *química aplicada*, que é opcional para a maior parte dos cursos de química.

O especialista explica que apesar do nome ser simples, uma vez que toda química é aplicada, a disciplina tem como propósito explicitar o funcionamento das

coisas, sejam coloides ou outros materiais, mais comumente os polímeros. Explicar o funcionamento de surfactantes, umectantes, as diferentes propriedades entre polímeros, tudo isso, em uma perspectiva molecular.

Assim como outros especialistas, P9 sugere que os mesmos conceitos sejam vistos em diferentes disciplinas do currículo, com um aumento do grau de complexidade em cada etapa, isso pode proporcionar melhorias no aprendizado.

P10 afirma que não mudaria nada em termos de grade curricular, mas seria fundamental o aprofundamento por meio da inserção de exemplos, experiências, das mais simples até algumas mais complexas. Demonstrando, a importância das interações intermoleculares, desde o curso de introdução da química geral, até os cursos mais avançados de físico-química, e em todas essas disciplinas, existem espaços para introduzir problemas, induzir os estudantes a pensarem.

De acordo com o especialista, só apresentar a teoria de ligações químicas clássicas não é suficiente, deve-se causar um problema, por exemplo, em uma prática de laboratório, envolvendo a solubilidade dos compostos, instigar os estudantes a explicarem tal fenômeno para ir introduzindo os conceitos.

Questionado sobre a utilização de modelos quântico-computacionais no currículo, P10 pontua que os modelos são sempre úteis para racionalizar um conjunto de dados, mas ressalta que são mais apropriados, quando esses modelos mostram tendências ao invés de um único valor ou dado.

Para o especialista P10, um exemplo disso, é demonstrar as tendências de hidrocarbonetos halosubstituídos, variando halogênio, depois variando o tamanho da cadeia com o mesmo halogênio, poderia ser bastante útil.

Já o especialista P11 considera que o tema deveria ser organizado na grade curricular da graduação em química, através da ênfase em ferramentas computacionais, pois assim, é possível verificar a relação entre modelo e resultado.

Em síntese, boa parte dos especialistas não sugerem mudanças significativas na grade curricular, mas consideram que um caminho viável seria a retomada dos principais conceitos acerca das interações intermoleculares em diferentes disciplinas do curso de graduação em química.

Essa retomada é possível em função do tema estar disseminado pelo currículo do curso de química, dentre esses especialistas, alguns destacam que os conceitos podem ser introduzidos de forma gradativa e aumentando a complexidade deles ao longo do curso.

Dois dos especialistas não mudariam nada em relação ao currículo atual do curso de química, um deles apenas salienta que em algumas disciplinas, as interações intermoleculares podem ser mais exploradas e o outro defende que se tenha uma padronização da forma de ensino.

E essa padronização deve ser fundamentada em práticas de ensino, consideradas mais modernas e atrativas, que incluem a introdução de conceitos de simulação computacional aos modelos já presentes nos livros-texto, cujas mudanças não são tão rápidas.

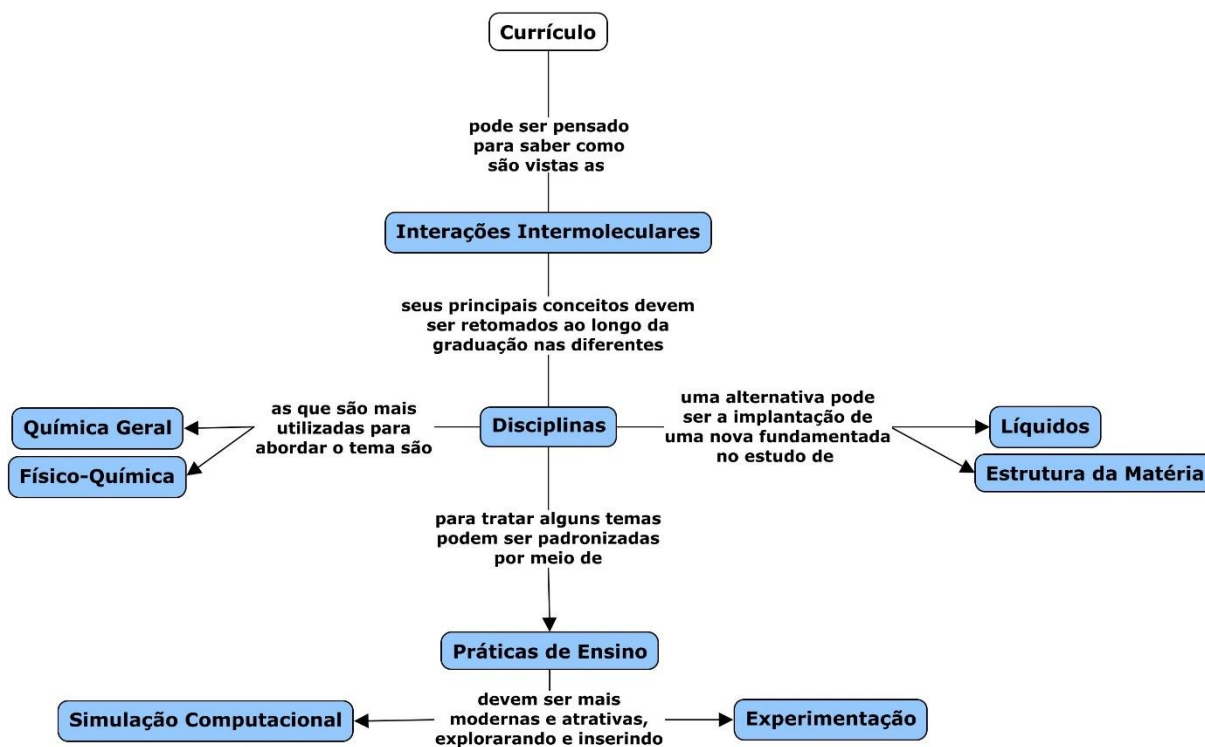
Simulação computacional e cálculos quânticos foram discutidos por outros especialistas e considerados ferramentas importantes para explorar os principais conceitos nas diferentes disciplinas da graduação em química.

Mesmo que de formas distintas, alguns especialistas sugerem que o tema deve ser apresentado, com ênfase nas interações eletrostáticas e equações em que os termos que representam cada tipo de interação são dispostos em uma somatória, contribuindo para uma visão unificada das interações, essa metodologia poderia ser aplicada em química geral.

Para concluir, dois dos especialistas consideram que uma nova disciplina poderia ser elaborada, especialmente pela importância do tema, um deles sustenta, que o enfoque seria no estudo dos líquidos e, o outro, no aprofundamento de conceitos relacionados ao tema, vistos em química geral e físico-química.

A (figura 36) apresenta um mapa conceitual construído, com o objetivo de sintetizar as principais concepções dos especialistas em relação ao tema no currículo. É importante ressaltar que a maioria dos especialistas não abordou tantos aspectos envolvendo o currículo e, as concordâncias ficaram mais centradas em como o tema é presente no currículo e, quais os conceitos fundamentais devem ser retomados nas disciplinas, com distintos níveis de complexidade.

Figura 34 - Mapa conceitual com as concepções sobre o tema no currículo.



Fonte: autoria própria.

Em termos de conteúdos conceituais, onde os princípios são conceitos mais gerais que transpassam todos os outros, mesmo que de forma implícita, as principais ideias levantadas sobre o currículo apresentam esse aspecto, tanto a retomada dos conceitos fundamentais, durante todo o curso, em diferentes níveis de complexidade, quanto práticas de ensino, que explorem simulação e a experimentação para serem onipresentes na graduação.

## 7 NOSSA TESE FINAL

É fundamental que antes das conclusões, nossa tese sobre as interações intermoleculares na graduação em química seja apresentada, para a compreensão dos principais aspectos que consideramos importantes e podem contribuir para melhorar o entendimento do tema.

Vemos como uma alternativa perfeitamente possível e organizada, do ponto de vista conceitual, iniciar o estudo das interações intermoleculares através da estrutura molecular e dos parâmetros moleculares, necessários para a efetiva compreensão da distribuição de cargas nas diferentes estruturas dos compostos químicos.

A geometria molecular é um dos parâmetros que está fortemente relacionado a como as cargas estão distribuídas nas estruturas e como interagem entre elas. Além das interações dessas cargas com o núcleo, por consequência, o conceito de geometria molecular, pode ser uma boa base à introdução do tema.

O momento de dipolo é um parâmetro fundamental e que estabelece a relação entre cargas em função das distâncias entre elas, tal parâmetro, é muito importante para a compreensão da natureza elétrica das substâncias, uma vez que, considera a disposição das cargas elétricas nas estruturas moleculares e caracteriza a magnitude do comportamento de tais estruturas, na presença de campos elétricos.

Além desses parâmetros, os conceitos de densidade eletrônica e polarizabilidade são essenciais para que os estudantes assimilem a noção de que os elétrons não permanecem estáticos e, essa dinâmica pode ser bem representada através de tais parâmetros. A polarizabilidade fundamenta a ideia de quão fácil essa nuvem eletrônica é deformada pela ação de um campo elétrico e isso diz muito sobre a natureza de uma dada espécie química.

O próximo passo seria a caracterização de cada tipo de interação e suas principais características, sempre evidenciando, que todas as interações intermoleculares podem ser classificadas como interações eletrostáticas, aspecto que proporciona uma visão unificada das diferentes interações, uma vez que o processo envolvido é fisicamente semelhante e a distinção principal está relacionada à energia.

A energia de interação, que muitas vezes, fica restrita às tabelas com os valores correspondentes das respectivas intensidades de cada tipo de interação, o

que pode gerar concepções equivocadas sobre uma interação ser mais forte que outra, independente de diversos aspectos que devem ser ponderados.

Ter noção da magnitude das interações é muito importante, em especial para diferenciação da energia envolvida, quando comparadas às ligações químicas. No entanto, algo que poderia acrescentar no contexto do tema seria a apresentação da equação de energia de interação atrativa total, em que há uma somatória das equações de energia das interações de van der Waals, constituídas pelas interações dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido e dipolo induzido-dipolo induzido.

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

É óbvio que existem outras formas de representar essa contribuição dos diferentes tipos de interações, em um mesmo sistema molecular, como gráficos e tabelas, mas a equação de energia de interação total, além de proporcionar uma visão unificada das interações, destaca a importância dos parâmetros moleculares que representam tais interações e a relação com as distâncias intermoleculares.

No sentido desse último apontamento, o modelo que pode ser apresentado de forma didática, que traz a correlação entre a energia das interações atrativas e repulsivas em função da distância intermolecular, é o potencial de Lennard-Jones, que tanto a equação quanto o gráfico, podem auxiliar na compreensão da relação energia/distância e no entendimento de que a principal diferença entre as interações, é pautada, principalmente em energia.

Outro ponto essencial para a compreensão do tema, é que tanto fenômenos, quanto as propriedades físico-químicas, sejam interpretadas e/ou explicadas, com base nas interações intermoleculares. Os diversos fenômenos envolvendo líquidos podem ser oportunos para o estudo das interações, desde pontos de ebulição, capilaridade e volatilidade, até mais complexos, como tensão superficial, cromatografia e a própria mistura de líquidos.

A solubilidade é também um fenômeno muito apropriado para discussão e compreensão de muitos conceitos relacionados às interações intermoleculares e deve ser explorado na abordagem do tema. O tema interações intermoleculares pode ser um dos tópicos de química capaz de ser o elo entre a perspectiva macroscópica e o comportamento submicroscópico de átomos e moléculas, tanto nos fenômenos, quanto nas propriedades físico-químicas.

Dos tipos de interações que demandam maior detalhamento no estudo do tema, em função do conhecimento relacionado à natureza de tais interações ser recente e ainda objeto de novos estudos, além dos equívocos cometidos no âmbito da aprendizagem dessas interações, são as respectivas interações dispersivas e ligações de hidrogênio.

Dois princípios fundamentais acerca das interações dispersivas são a compreensão da aditividade e o caráter universal desse tipo de interação, muitas vezes classificadas como fracas, as forças dispersivas estão presentes em todos os sistemas moleculares e somam-se às demais interações, possivelmente presentes, mesmo em compostos polares, essas interações podem proporcionar a maior contribuição da energia de interação total de muitos compostos.

Já as ligações de hidrogênio são importantíssimas na explicação de uma gama de fenômenos, especialmente envolvendo os líquidos e o fenômeno de solubilidade em água. Também é fato, que há muitos outros conceitos, que são estimulados a partir do estudo das ligações de hidrogênio, mas basicamente, é essencial que se tenha a noção da magnitude, distância e ângulos típicos de tais ligações, além das definições que caracterizam as ligações de hidrogênio com caráter parcialmente covalente.

Nesse contexto dos fenômenos e das propriedades físico-químicas, uma via interessante, é a utilização de técnicas de simulação e também de detecção de alguns tipos de interações, como uma forma de melhorar a compreensão de tais fenômenos. Por exemplo, a mistura de líquidos pode ser observada a nível molecular, por meio de softwares de simulação e as mudanças estruturais serem acompanhadas, através da espectroscopia vibracional na região do infravermelho.

Por fim, uma noção fundamental aos estudantes de graduação em química, está centrada no aspecto estatístico das interações intermoleculares, que pode ser explorado, a partir da simples distinção entre os conceitos de molécula e substância. A própria representação das interações, na maior parte dos materiais didáticos, é dada por pares de moléculas, enquanto, na prática, uma pequena amostra de determinada substância é constituída por uma enorme quantidade de moléculas.

Portanto, um dos principais objetivos que deve ser observado pelos egressos do ensino superior em química, no contexto das interações intermoleculares, é a capacidade intrínseca de interpretação dos fenômenos e propriedades, em uma perspectiva atômico-molecular, que muitas vezes, é caracterizado como a

compreensão da relação estrutura-propriedade. Assim, o estudo das interações intermoleculares pode ser considerado, o principal tópico do conhecimento químico, para introduzir e aprimorar essa competência aos químicos.



## 8 CONCLUSÕES

O presente trabalho foi orientado pelo objetivo geral de estudar as concepções de especialistas sobre quais seriam os conhecimentos e ideias fundamentais sobre o tema interações intermoleculares na graduação em Química. Para tanto, foram feitas análises de como o tema é apresentado na literatura científica, por meio de uma pesquisa bibliográfica, os principais conceitos que emergiriam dos artigos analisados relacionados ao tema no ensino superior em química e quais as concepções dos pesquisadores especialistas, com base nos conteúdos conceituais proposto por Pozo e Crespo (2009).

A análise das publicações selecionadas permitiu mostrar a diversidade de conhecimentos, no contexto do tema, destacando os diferentes conceitos envolvidos e a amplitude dele. No entanto, ressalta-se que os conteúdos conceituais, que foram capazes de abranger os principais aspectos levantados pela análise dos artigos foram os seguintes: Equação de van der Waals, Energia de Interação, Interações dispersivas, Ligações de hidrogênio e Propriedades físico-químicas.

A equação de van der Waals pode ser considerada uma temática pioneira na abordagem das interações intermoleculares, uma vez que busca explicar, o comportamento de gases que apresentam desvio da idealidade. A introdução de parâmetros para a representação das forças atrativas e repulsivas entre átomos e moléculas proporcionada pela equação, esta que é fundamental para a compreensão da evolução dos conceitos que fazem parte do estudo das interações intermoleculares.

Já o tópico *energia de interação* tem a capacidade de abranger muitas ideias e conceitos importantes relacionados às interações intermoleculares. Inicialmente, a própria noção das magnitudes, correspondentes a cada tipo de interação, as equações de energia de interação total, que enfatizam a ideia de unificação e aditividade das interações intermoleculares. Os parâmetros moleculares, como momento de dipolo e polarizabilidade, correlacionados às distâncias intermoleculares via equações, juntos ao potencial de Lennard-Jones são fundamentais na compreensão da energia de interação.

As interações dispersivas também foram o foco de grande parte das publicações analisadas e seu entendimento demanda de parâmetros, como nuvem eletrônica, geometria molecular e, por consequência, a própria polarizabilidade.

Porém, pontos importantes, que necessariamente devem ser discutidos, trata-se da aditividade e universalidade dessas interações, cuja compreensão pode ser facilitada através de analogias, parâmetros menos complexos como a área superficial e fenômenos físico-químicos.

As ligações de hidrogênio, que são destaque dada a importância dentre todas as interações intermoleculares, tanto pela sua intensidade em relação as demais interações, quanto à sua correlação em diversas propriedades e fenômenos. Há que se destacar, que a definição não pode ficar restrita somente a hidrogênio ligado a átomos eletronegativos, é fundamental, a percepção da amplitude, que envolve a natureza da ligação de hidrogênio. A necessária noção da distância e ângulos típicos de tais ligações, os diferentes tipos de ligações de hidrogênio em função da energia, também, das estruturas moleculares.

Por fim, as propriedades físico-químicas, que perpassam inevitavelmente por todo o conhecimento das interações intermoleculares, uma vez que grande parte dos conceitos fundamentais ao tema, são bem mais compreendidos quando propriedades e fenômenos são discutidos.

Os resultados aqui apresentados indicam que os pesquisadores entrevistados consideram fundamental, o entendimento da relação entre as propriedades físico-químicas e a estrutura molecular, para facilitar a interpretação molecular de tais propriedades. Pode-se inferir, com base nos resultados, que o tema demanda de uma introdução aos parâmetros moleculares, sobretudo polaridade, polarizabilidade, geometria, estrutura molecular, potencial eletrostático e densidade eletrônica, para que haja domínio da natureza elétrica e das características estruturais de cada sistema molecular.

No mais, é fundamental considerar a energia envolvida em função da distância intermolecular, para cada tipo de interação, explorada por meio de gráficos, simulações computacionais e equações, as últimas, que são capazes de evidenciar os principais parâmetros de cada interação, além do caráter aditivo e da visão unificada das interações.

Os resultados do presente trabalho podem servir também, como base para a compreensão das interações intermoleculares, centrada nos parâmetros moleculares e, fundamentalmente, na distribuição e dinâmica dos elétrons nas estruturas moleculares. Além de proporcionar reflexões ou mudanças a serem consideradas, oferecendo suporte para outras investigações da área de ensino de química.

As considerações realizadas podem ser utilizadas para reflexão sobre como as forças intermoleculares estão sendo abordadas nos currículos, livros didáticos e nas próprias aulas em cursos de graduação em química, o que precisa ser considerado ou modificado, bem como oferecer subsídios para futuras pesquisas.

A análise das entrevistas com especialistas, levanta algumas implicações no sentido de atualização de livros-texto e práticas de ensino, que contribuam para melhor formação dos químicos. As principais ideias-chave se resumem, na unificação das interações intermoleculares, que pode ser mais bem compreendida por meio da exploração da equação de energia de interação total, considerando as diferentes contribuições de forças atrativas e repulsivas, além do potencial de Lennard-Jones, que contribui na ilustração das forças atuantes e na relação entre a energia envolvida em função da distância intermolecular.

Lembrando que ferramentas de simulação computacional podem ser utilizadas para evidenciar estes aspectos, na formação inicial dos químicos. A ênfase maior nos parâmetros que foram elencados, para proporcionar aos graduandos uma visão mais molecular das interações entre as moléculas.

Em conclusão, as questões de pesquisa apresentadas na parte inicial do presente trabalho foram respondidas e elencadas mais à frente. A princípio sobre “*O que um químico precisa saber sobre o tema interações intermoleculares ao término de seu curso de graduação?*”

Considerando a pesquisa bibliográfica e as entrevistas com especialistas sobre o tema, o químico precisa compreender a distribuição de cargas nas estruturas moleculares através da noção dos principais parâmetros moleculares que o proporcione tal entendimento, como nuvem eletrônica, momento de dipolo, polarizabilidade, geometria e estrutura molecular, sobretudo, a natureza e a origem das interações intermoleculares.

Ter noção da energia de interação relacionada a cada tipo de interação e diferença de magnitude entre cada tipo e em relação às ligações químicas. Considerar que em muitos sistemas moleculares a energia de interação total é resultado da composição de várias forças interativas, por consequência, existem equações que permitem a quantificação da contribuição de cada uma dessas forças, além de ponderar a influência da relação existente entre cargas das moléculas e as distâncias intermoleculares. Em especial, a equação de energia de interação total deve proporcionar, a ideia de uma visão unificada das interações intermoleculares, a

compreensão do caráter universal e aditivo das forças dispersivas e a percepção da importância dos parâmetros utilizados para cada tipo de interação na equação.

Conhecer as novas definições das ligações de hidrogênio, não restritas a ideia da interação do hidrogênio com os átomos eletronegativos de flúor, oxigênio e nitrogênio. Saber das características das ligações de hidrogênio denominadas não clássicas, da direcionalidade das ligações propiciada pelos ângulos e distâncias típicas das ligações de hidrogênio, que permitem classificá-las quanto à intensidade, em alguns casos, caracterizadas como parcialmente covalentes. Reconhecer a existência de ligações de hidrogênio intramoleculares e saber que a energia de ligação da ligação de hidrogênio também pode ser entendida como a composição de forças distintas.

Por fim, compreender que o químico deve ter uma interpretação submicroscópica dos fenômenos, que, em geral, envolvem substâncias químicas, daí a importância de saber que as interações intermoleculares ocorrem entre um enorme número de moléculas que constituem essas substâncias. Condicionar a interpretação para além de um par de átomos e/ou moléculas interagindo, tanto pela diferenciação conceitual entre molécula e a substância, quanto pela gama de possibilidades interativas em sistemas moleculares.

*Quais são os princípios fundamentais e os conceitos que formam uma estrutura conceitual sobre este tema?*

- A unificação das interações intermoleculares é fundamental para o reconhecimento das contribuições de cada tipo de interação em dados sistemas moleculares;
- Em todo sistema envolvendo interações entre átomos e/ou moléculas deve ser considerado o caráter universal das forças dispersivas;
- A direcionalidade (distância e ângulos típicos) das ligações de hidrogênio é fundamental para classificar sua intensidade;
- A interpretação dos fenômenos e propriedades pelos químicos deve ser realizada em uma perspectiva atômico-molecular;
- As Interações intermoleculares fornecem a base molecular para o entendimento de qualquer sistema aplicado;
- É fundamental a compreensão de que a experimentação em Química não se realiza efetivamente a partir de moléculas isoladas;

Concluindo, do ponto de vista do ensino do tema, defendemos aqui, que uma importante forma de contemplar os princípios aqui elencados, é desenvolver abordagens didáticas sobre o tema interações intermoleculares, com base no tripé: Seleção de conteúdos conceituais de acordo com os conceitos e princípios acima apresentados; Discussão, análise e desenvolvimento de modelos explicativos a respeito dos fenômenos macroscópicos citados ao longo desta tese; Fazer uso de estruturas moleculares que apresentem aspectos moleculares, como superfície potencial, distribuição de cargas e volume molecular.

## REFERÊNCIAS

- AGUIAR, C. Z., CURY, D., ZOUAQ, A. (2019). Mining Concept Map from Text in Portuguese (Minerando Mapa Conceitual a partir de Texto em Português). **Brazilian Journal of Computers in Education** (Revista Brasileira de Informática na Educação - RBIE), v. 27, n. 1, p. 83-103, 2019.
- ARUNAN, E., DESIRAJU, G. R.; KLEIN, R. A.; SADLEJ, J.; SCHEINER, S.; ALKORTA, I.; CLARY, D. C.; CRABTREE, R. H.; DANNENBERG, J. J.; HOBZA, P.; KJAERGAARD, H. G.; LEGON, A. C.; MENNUCCI, B. e NESBITT, D. J. Defining the hydrogen bond: an account, **IUPAC technical report**, n. 83, p. 1619-1636, 2011.
- AUSUBEL, D. P., NOVAK, J. D. e HANESIAN, H. **Psicologia educacional**. Tradução de Eva Nick. Rio de Janeiro: Editora Interamericana Ltda, 1980.
- AUSUBEL, D. P. **Aquisição e retenção de conhecimentos: uma perspectiva cognitiva**. Lisboa: Plátano Edições Técnicas. Tradução de The acquisition and retention of knowledge: a cognitive view. (2000). Kluwer Academic Publishers, 2003.
- ATKINS, P.W.; JONES, Loretta. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 3.ed. Porto Alegre: Bookman, 2006. 965 p.
- ATKINS, P. W. **Físico-Química**. Vol. 2. 6ª Ed. Rio de Janeiro: L. T. C. Editora S.A., 1999. 382 p.
- BARDIN L. **Análise de conteúdo**. Lisboa: Edições 70; 1977.
- BARREIRO, E.J; FRAGA, C.A.M. **Química Medicinal: As Bases Moleculares da Ação dos Fármacos**. 3ª Edição, Editora ArtMed, Porto Alegre, 2015.
- BATTINO, R., LETCHER, T. M. An Introduction to the Understanding of Solubility. **Journal of Chemical Education**, v. 78, n. 1 p. 103-111, 2001.
- BISPO, H.; VASCONCELOS, S. F.; CHAVES, F. J. F.; FERNANDES, C. V.; SILVA, N.; BISPO, H. Estudo e análise da mistura de água e etanol através de equações de estado. XX **Congresso Brasileiro de Engenharia Química**, COBEQ, Florianópolis, SC, 2014.
- BROOKHART, M., GREEN, M. L. H., PARKIN, G. Agostic interactions in transition metal compounds, **Proceedings of the National Academy of Sciences U.S.A**, v. 114, n.117, p. 6908-6914, 2007.
- BUCKINGHAM, A.D., FOWLER, P.W., HUTSON, J.M. Theoretical Studies of van der Waals Molecules and Intermolecular Forces. **Chemical Reviews**, v. 88, n. 6, p. 963-988, 1988.
- BUENO, W. A. **Ligação de hidrogênio**. São Paulo: McGraw-Hill, 1978.

BURKHOLDER, P. R., PURSER, G. H., COLE, R. S. Using Molecular Dynamics Simulation To Reinforce Student Understanding of Intermolecular Forces. **Journal of Chemical Education**, v. 85, n. 8, p. 1071-1077, 2008.

CAREY, F. A. Química Orgânica. 7. ed. Porto Alegre: AMGH Editora Ltda., 2011. v.1, 764 p.

CHALASINSKI, G., GUTOWSKI, M. Weak Interactions between Small Systems. Models for Studying the Nature of Intermolecular Forces and Challenging Problems for ab Initio Calculations. **Chemical Reviews**, v. 88, n. 6, p. 943-962, 1988.

COLL, C., POZO, J. I., SARABIA, B., VALLS, E. **Os conteúdos na reforma**: ensino e aprendizagem de conceitos, procedimentos e atitudes. Porto Alegre: Artmed, 2000.

CORENO-ALONSO, J., MENDEZ-BAUTISTA, M. T. (2010). Relación estructura-propiedades de polímeros. **Educación Química**, v. 21, n. 4, p. 291-299, 2010.

COUGO-PINTO, M. V., FARINA, C., TORT, A. O Efeito Casimir. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 22, n. 1, p. 122-132, 2000.

COULSON C. A. The hydrogen bond - a review of the present position, **Research**, v. 10, p. 149–159, 1957.

COULSON, C. A. The nature of the bonding in xênon fluorides and related molecules, **Journal of the Chemical Society**, p. 1442–1454, 1964.

RODRIGUES, S. B. V.; DA-SILVA, D.C.; QUADROS, A. L. O ensino superior de química: reflexões a partir de conceitos básicos para a química orgânica. **Química Nova**, v. 34, n. 10, p. 1840-1845, 2011.

De OLIVEIRA, I. T., MAXIMIANO, F. A. Conceitos aprendidos pelos alunos de graduação em Química: uma análise através do uso de Mapas Conceituais. In: XVI Encontro Nacional de Ensino de Química (XVI ENEQ) e X Encontro de Educação Química da Bahia (X EDUQUI), Anais... Salvador, 2012.

DEAN, P. A. W. Facets of van der Waals Radii That Are Not Commonly Included in Undergraduate Textbooks. **Journal of Chemical Education**, v. 91, n. 1, p. 154–157, 2014.

DESIRAJU, G. R. A Bond by Any Other Name. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 50, p. 52–59, 2011.

DE VISSER, S. van der Waals Equation of State Revisited: Importance of the Dispersion Correction. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 115, n. 16, p. 4709-4717, 2011.

DOUGLAS, J.E., KOLLMAN, P. A. A Model Equation for the Analysis of Noncovalent Intermolecular Interactions. **Journal of the American Chemical Society**. v. 102, n. 13, p. 4295-4302, 1980.

DREW, M. **Surfaces, Interfaces, and Colloids: Principles and Applications: 2nd (second) Edition**, John Wiley & Sons, 1999.

FARINA, C., SOUZA R. M., KORT-KAMP W. J. M., SIGAUD C. Image method in the calculation of the van der Waals force between an atom and a conducting surface. **American Journal of Physics**, v. 81, n. 5, p. 366-376, 2013.

FODOR, J. **Conceptos: Donde la ciencia cognitiva se equivocó**. Barcelona: Gedisa, 1999.

FOWKES, F. M. Additivity of intermolecular forces at interfaces. i. Determination of the contribution to surface and interfacial Tensions of dispersion forces in various liquids. **The Journal of Physical Chemistry**. v. 67, n. 12, p. 2538–2541, 1963.

FUJISAWA, D. S. **Utilização de jogos e brincadeiras como recurso no atendimento fisioterapêutico de criança: implicações na formação do fisioterapeuta**. Dissertação (Mestrado em Educação) - Faculdade de Filosofia e Ciências, Universidade Estadual Paulista, Marília, 2000.

FRASSON, F., LABURÚ, C. E., ZOMPERO, A. F. Aprendizagem significativa conceitual, procedimental e atitudinal: uma releitura da teoria ausubeliana. **Revista Contexto & Educação**, v. 34, n. 108, p. 303–318, 2019.

GALEMBECK, S. E., VESSECCHI, R., LOPES, N. P., NASCIMENTO, P. G. B. D., CROTTI, A. E. M. Aplicação da química quântica computacional no estudo de processos químicos envolvidos em espectrometria de massas. **Química Nova**, v. 31, n. 4, p. 840-853, 2008.

GARCÍA-SALGADO, D. E., AGUILAR-TAMAYO, M. F., ESPINOSA-MONTERO, J., MANZANO-CAUDILLO, J. Modelos de Conocimiento: Uma Metodología de Investigación em el Posgrado. **Conference on Concept Mapping - CMC**, Santos, Brazil, 2014.

GARCÍA-SALGADO, D. E., AGUILAR-TAMAYO, M. F. Mapas Conceptuales en los procesos de investigación educativa. **Proceedings of Seventh Conference on Concept Mapping**, Tallinn, Estônia, 2016.

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.

GRABOWSKI, S. J., SOKALSKI, W. A., LESZCZYNSKI, J. Hydride bonding – Ab initio studies of  $\text{BeH}_2\cdots\text{Li}^+$ ,  $\text{BeH}_2\cdots\text{Na}^+$  and  $\text{BeH}_2\cdots\text{Mg}^{2+}$  model systems. **Chemical Physics Letters**, v. 422, n. 4-6, p. 334-339, 2006.

GRABOWSKI, S. J. What Is the Covalency of Hydrogen Bonding? **Chemical Reviews**, v. 111, p. 2597–2625, 2011.

GOTTSCHALK, E.; VENKATARAMAN, B. Visualizing Dispersion Interactions. **Journal Chemical Education**, v. 91, n. 5, p. 666–672, 2014.



GUIMARÃES, C. R. W. As Múltiplas Contribuições para a Complexação Proteína-Ligante: Consequências em Drug Design. **Revista Virtual de Química**, v. 4, n. 4, p. 348-364, 2012.

HERBST, M. H.; MONTEIRO FILHO, A. R. M.; Um Outro Olhar Sobre as Ligações Hidrogênio. **Química Nova na Escola**, São Paulo, v. 41, n. 1, p. 10-16, 2019.

HOLSTEIN, B. R. The van der Waals interaction. **American Journal of Physics**, v. 69, n. 4, p. 441-449, 2001.

International Union of Pure and Applied Chemistry - IUPAC. Compendium of Chemical Terminology - **Gold Book**, 2014. A versão atualizada até julho de 2019 está disponível em: <https://goldbook.iupac.org/>.

ISRAELACHVILI J. N. **Intermolecular and Surface Forces**, 3rd, Elsevier, Academic Press, 2011.

JASIEN, P. G. Helping Students Assess the Relative Importance of Different Intermolecular Interactions. **Journal of Chemical Education**, v. 85, n. 9, 2008.

JIMÉNEZ, A. M. P., SANMARTÍ, N. **Que Ciencia Ensiñar**: Objetivos e contenidos de la educación secundaria. Em del Carmen (ad). Cuadernos de Formación del Profesorado de Educación Secundaria: Ciencias de la naturaleza. Barcelona: Horsori, 1997.

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**. [Tese]. São Paulo: Universidade de São Paulo, Instituto de Química, 2017.

JUNQUEIRA, M. M., MAXIMIANO, F. A. Interações intermoleculares e o fenômeno da solubilidade: explicações de graduandos em química. **Química Nova**, v. 43, n. 1, p. 106-117, 2020.

JUNQUEIRA, M. M., MAXIMIANO, F. A. Obtenção da estrutura conceitual do tema interações intermoleculares através da transformação de textos em mapas conceituais. **Caminhos da Educação Matemática em Revista (On-Line)**, v. 101, p. 87-106, 2020.

KHALIULLIN R. Z., COBAR E. A., LOCHAN R. C., BELL A. T., HEAD-GORDON M. Unravelling the Origin of Intermolecular Interactions Using Absolutely Localized Molecular Orbitals. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 111, n. 36, p. 8753-8765, 2007.

KOLLMAN, P. A. A General Analysis of Noncovalent Intermolecular Interactions. **Journal of the American Chemical Society**. v. 99, n. 15, p. 4875-4894, 1977.

KOTZ, J. C.; TREICHEL, P. M.; WEAVER, G. C. **Química Geral e Reações Químicas**, 1-2. 6ª ed. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

LEAL, R. C., NETO, J. M. M., LIMA, F. C. A., FEITOSA, C. M. A química quântica na compreensão de teorias de química orgânica. **Química Nova**, v. 33, n. 5, p. 1211-1215, 2010.

LINING ZHENG, L., DU, J. A nonextensive approach for understanding the van der Waals' equation. **European Journal Physical**, v. 39, n. 6, 2018.

LÜDKE, M.; ANDRÉ, M. E. D. A. **Pesquisa em educação: abordagens qualitativas**. São Paulo: EPU, 1986.

MANZINI, E. J. Entrevista semi-estruturada: análise de objetivos e de roteiros. In: SEMINÁRIO INTERNACIONAL DE PESQUISA E ESTUDOS QUALITATIVOS, 2, A pesquisa qualitativa em debate, Bauru, 2004. **Anais...**, Bauru: SIPEQ, 1 CD-ROM, 2004.

MARTINS, C.R.; LOPES, W.A.; ANDRADE, J.B. Solubilidade das substâncias orgânicas. **Química Nova**, v.36, n. 8, p. 1248-1255, 2013.

MAYRING, Ph. **Einführung in die qualitative Sozialforschung** [Introdução à pesquisa social qualitativa: Uma orientação ao pensamento qualitativo]. 5. ed. Weinheim: Beltz, 2002.

MCLEMORE, S., WEHRY, S., CARLSON, D. L. The teachers' voice: forming a theoretical framework combining a prekindergartenstem curriculum and a learning curriculum. **Proceedings of Seventh Conference on Concept Mapping**, Tallinn, Estônia, 2016.

MOHAJERI, A., ALIPOUR, M., MOUSAEI, M. Halogen-Hydride Interaction between Z-X (Z = CN, NC; X = F, Cl, Br) and H-Mg-Y (Y = H, F, Cl, Br, CH<sub>3</sub>), **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 115, n. 17, p. 4457-4466, 2011.

MOORE, W.J. **Physical Chemistry**. 4th Edition, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1972.

MORAES, S. L., REZENDE, M. O. O. Determinação da concentração micelar crítica de ácidos húmicos por medidas de condutividade e espectroscopia. **Química Nova**, v. 27, n. 5, p. 701-705, 2004.

MOREIRA, M. A. Mapas Conceituais e Aprendizagem Significativa. Adaptado de: O Ensino. **Revista Galáico Portuguesa de Sócio-Pedagogia e Sócio-Linguística**. n.23, p.87-95, 1988.

MOREIRA, M. A. **Mapas conceituais e aprendizagem significativa**. São Paulo: Centauro, 2010.

MOREIRA, M. A. E BUCHWEITZ, B. **Novas estratégias de ensino e aprendizagem: os mapas conceituais e o Vê epistemológico**. Lisboa: Plátano Edições Técnicas, 1993.

MUNZAROVA M. L. AND HOFFMANN R. Electron-rich three center bonding: Role of s, p interactions across the p-block, **Journal of the American Chemical Society**, v. 124, p. 4785–4795, 2002.

MURTHY, P. S. Molecular Handshake: Recognition through Weak Noncovalent Interactions. **Journal of Chemical Education**. v. 83, n. 7, p. 1010-1013, 2006.

NOVAK, J.D. Concept maps and Vee diagrams: two metacognitive tools to facilitate meaningful learning. **Instructional Science**, v.19, p.29-52, 1990.

NOVAK, J. D., CAÑAS, A. J. **A teoria subjacente aos mapas conceituais e como elaborá-los e usá-los**. Práxis Educativa, v. 5, p. 9-29, 2010.

NOVAK, J. D., MUSONDA, D. A Twelve-Year Longitudinal Study of Science Concept Learning. **American Educational Research Journal**, v. 28, n. 1, p. 117-153, 1991.

OLIVEIRA, B. G., ARAÚJO, R. C. M. U. SAPT: ligação de hidrogênio ou interação de van der Waals? **Química Nova**, v. 35, n. 10, p. 2002-2012, 2012.

OLIVEIRA, G, B. O estado da arte da ligação de hidrogênio, **Química Nova**, v. 38, n. 10, p. 1313-1322, 2015.

OLIVEIRA, B. G., ARAÚJO, R. C. M. U., LEITE, E. S., RAMOS, M. N. "A Theoretical Analysis of Topography and Molecular Parameters of the  $\text{CFCl}_3\cdots\text{O}_3$  Complex: Linear and Bifurcate Halogen-Oxygen Bonding Interactions," **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 111, n. 1, p. 111-116, 2011

PADDAY, J. F., UFFINDELL, N. D. The Calculation of Cohesive and Adhesive Energies from Intermolecular Forces at a Surface. **The Journal of Physical Chemistry**, v. 72, n. 5, p. 1407–1414, 1968.

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.

PARTHASARATHI, R., SUBRAMANIAN, V. Stacking interactions in benzene and cytosine dimers: From molecular electron density perspective. **Structural Chemistry**, v. 16, n. 3, p. 243-255, 2005.

PECKHAM, G. D.; McNAUGHT, I. J. Teaching Intermolecular Forces to First-Year Undergraduate Students. **Journal of Chemical Education**, v. 89, p. 955-957, 2012.

PEEK-BROWN, D., STEVENS, S. Y., SHIN, N. (2013). Learning progressions as a guide for developing meaningful science learning: A new framework for old ideas. **Educación Química**, v. 24, n. 4, p. 381-390.

PIMENTEL, G. C. The bonding of trihalide and bifluoride ions by the molecular orbital method, **The Journal of Chemical Physics**, v. 19, p. 446–448, 1951.

PIMENTEL G. C.; MCCLELLAN A. L. **The Hydrogen Bond**, W. H. Freeman: New York, 1960.

POZO, J. I.; CRESPO, M. A. G. **A aprendizagem e o ensino de ciências: do conhecimento cotidiano ao conhecimento científico**. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2009.

POZO, J. I., PÉREZ, M. P.; SANZ, A. Y LIMÓN, M. Las ideas de los alumnos sobre la ciencia como teorías implícitas. **Infancia y Aprendizaje**, v. 57, p. 3-32, 1992.

POZO, R. M. Prospective teacher's ideas about the relationships between concepts describing the composition of matter. **International Journal of Science Education**, v. 23, n. 4, p. 353-371, 2001.

QUANE, D.; BULL. *History of Chemistry*, v. 7, n. 4, 1990.

RATAJCZAK H. Charge-transfer properties of hydrogen bonds. I. Theory of the enhancement of dipole moment of hydrogen-bonded systems, **The Journal of Physical Chemistry**, v. 76, p. 3000–3004, 1972.

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

REGIS, A; ALBERTAZZI, P.G.; ROLETTO, E. Concept Maps in Chemistry Education. **Journal of Science Education**, v.73, n.11, p.1084-1088,1996.

RIVERA-RIVERA L. A., WALTON J. R., LUCCHESI R. R., BEVAN J. W. Is there any fundamental difference between ionic, covalent, and others types of bond? A canonical perspective on the question. **Physical Chemistry Chemical Physics**. v. 19, p. 15864-15869, 2017.

ROCHA, W. R. Interações Intermoleculares. **Cadernos temáticos de Química Nova na Escola**, v. 4, p. 31-36, 2001.

RODRIGUES M. S. P., LEOPARDI, M. T. **O método de análise de conteúdo: uma versão para enfermeiros**. Fortaleza-CE, Fundação Cearense de Pesquisa e Cultura, 1999.

RUNDLE, R. E. Coordination number and valence in modern structural chemistry, **Record of Chemical Progress**, v. 23, p. 195–221, 1962.

SALVADOR, C. C, ALEMANY, I. G., MARTÍ, E., MAJÓS, T. M., MESTRES, M. M., GOÑI, J. O., GALLART, I. S. & GIMÉNEZ, E. V. **Psicologia do ensino**. Porto Alegre, RS: Artes Médicas, 2000.

SANT'ANNA, C. M. R., FRAGA, C. A. M., PINHEIRO, P. S. M., FOKOUE, H. H. Há algo novo no reconhecimento molecular aplicado à química medicinal? **Química Nova**, v. 43, n. 1, p. 78-89, 2020.

SANTOS, F. M. T.; GRECA, I. M. Promovendo a aprendizagem de conceitos científicos e de representações pictóricas em Química com uma ferramenta de simulação computacional. **Revista Electrónica de Enseñanza de las Ciencias**, v. 4, n. 1, 2005.

SIDGWICK, N. V.; CALLOW, R. K. Abnormal benzene derivatives. *Journal of the Chemical Society, Transactions*, n. 125, p. 527-538, 1924.

SMITH, C, NAKHLEH, M. B. University students' conceptions of bonding in melting and dissolving phenomena. **Chemistry Education Research and Practice**, n. 12, p. 398–408, 2011.

SMITH, C., CAREY, S. Y WISER, M. "On differentiation: A case study of the developments of the concepts of size, weight and density", **Cognition**, n. 21, p. 177-237, 1985.

STEED, J. W.; ATWOOD, L. J. "**Supramolecular Chemistry**". Weinhein: Wiley-VHC, 2009.

STONE, A. J., PRICE, S. L. Some New Ideas in the Theory of Intermolecular Forces: Anisotropic Atom-Atom Potentials. **The Journal of Physical Chemistry**. v. 92, n. 12, p. 3325-3335, 1988.

STRUYF, J. An Analytical Approach for Relating Boiling Points of Monofunctional Organic Compounds to Intermolecular Forces. **Journal of Chemical Education**, v. 88, n. 7, p. 937-943, 2011.

TADDEI, M. M., MENDES, T. N. C., Farina C. An introduction to dispersive interactions. **European Journal of Physics**. v. 31, n. 1, p. 89-99, 2010.

TRINDADE, D. F.; OLIVEIRA, F. P.; BANUTH, G. S. L.; BISPO, J. G. **Química Básica Experimental**, 5.ed. Editora Ícone, São Paulo, 2013.

TSAPARLIS, G. The logical and psychological structure of physical chemistry and its relevance to the organization/sequencing of the major áreas covered in physical chemistry textbooks. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 15, p. 391-401, 2014.

TOULMIN, S. **La comprensión humana**, Vol.1. El uso colectivo y la evolución de los conceptos. Madrid: Alianza, 1977.

TORRES, N. M.; DI GIACOMO, M. A.; BAUMGARTNER, E. C.; LANDAU, L. M. Interpretación submicroscópica de una propiedad física: ¿un problema resuelto? **Educación Química**, v. 21, n. 1, p. 40-46, 2010.

VEGA, P.R. D., GRACIA-FADRIQUE, J. van der Waals, más que una ecuación cúbica de estado. **Educación Química**, v. 26, p. 187-194, 2015.

VERGNAUD. G. La théorie des champs conceptuels. **Recherches en Didactique des Mathématiques**, v. 10, n. 23, p. 133-170, 1990.

WAN, E.; GALEMBECK, E.; GALEMBECK, F. Polímeros Sintéticos. Cadernos Temáticos de **Química Nova na Escola**. Ed. Especial, 2001.

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

WEINHOLD F.; LANDIS C. R. **Valency and Bonding**: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective, Cambridge University Press: Cambridge, UK, 2005.

ZABALA, A. **A prática Educativa**: Como Ensinar. São Paulo: Artmed, 224 p., 1995.

ZHU, R., CUI, S., WANG, X. Theoretical Foundation of Zisman's Empirical Equation for Wetting of Liquids on Solid Surfaces **European Journal of Physics**, v. 31 n. 2 p. 251-256, 2010.

## APÊNDICE A – Ficha de Análise dos artigos da pesquisa bibliográfica

DADOS DO ARTIGO	
<b>TÍTULO</b>	Molecular Handshake: Recognition through Weak Noncovalent Interactions
<b>AUTORES</b>	Parvathi S. Murthy
<b>BASE DE DADOS/REVISTA</b>	ERIC - Education Resources Information Center / Journal of Chemical Education
<b>VOLUME</b>	83
<b>Nº</b>	7
<b>ANO</b>	2006
<b>PÁGINAS</b>	04
<b>PAÍS</b>	Estados Unidos da América
<b>UNIVERSIDADE</b>	Department of Chemistry and Biochemistry, Georgian Court University, Lakewood, NJ
<b>SOBRE OS AUTORES</b>	Ph.D. (Organic Chemistry), Indian Institute of Science, Bangalore, India M.Sc.(Chemistry), Bangalore University, India B.Sc. (Physics, Chemistry and Mathematics), Bangalore University, India Research Area: Molecular mechanisms of organic biomimetic reactions Chemical education pedagogy
ANÁLISE	
RESUMO	
<p>A autora enfatiza a importância das interações intermoleculares, suas principais características, sobretudo as interações não covalentes mais fracas. De uma maneira bem didática e organizada, apresenta tópicos sobre a história das interações não covalentes, a natureza dessas interações e conclui com sugestões de abordagem das interações não covalentes em um currículo de graduação em química.</p>	
<b>Introdução</b>	Apresenta principalmente, questões relacionadas a aplicações das interações não covalentes, exemplos na natureza e propriedades físico-químicas que podem ser elucidadas pelas interações intermoleculares como: ponto de fusão, ponto de ebulição, tensão superficial, viscosidade e outras.
<b>História das interações não covalentes</b>	Inicia-se com o estudo sobre o fenômeno de capilaridade, desenvolvido por Clairault, em 1743. Em seguida a equação de estado de um gás ideal, logo J. van der Waals propõe com sucesso uma modificação na equação, com parâmetros que consideram interações de atração e repulsão. A autora também apresenta as contribuições de London e Debye, concluindo com um breve texto da descoberta das ligações de hidrogênio.
<b>Natureza das interações não covalentes</b>	Os tipos de interações são apresentados, sendo que a energia de interação é dependente das espécies envolvidas. Uma tabela detalha as interações não covalentes fracas, com dados sobre o tipo de interação, as substâncias envolvidas, o tipo de força e energia envolvidas.
<b>Interações não covalentes no currículo de graduação em química</b>	A autora destaca que as interações não covalentes são conceitos universais tão importantes e merecem maior ênfase no currículo de química. Em seguida descreve a partir de exemplos, como esse tema está inserido de maneira horizontal no currículo.

<b>Objetivo</b>	O artigo traça o desenvolvimento na concepção da autora, das interações não covalentes fracas e destaca suas principais características e sugere maneiras para uma exposição dos princípios destas interações não covalentes nos currículos de graduação em química.		
<b>Comentários e observações</b>	O artigo apresenta uma estruturação interessante, pois inicia com a história das interações não covalentes, do ponto de vista científico, em seguida a natureza das interações e um panorama de como esse tema aparece no currículo de graduação em química.		
<b>Conceitos em destaque</b>	Forças de van der Waals, Capilaridade, Equação geral dos gases ideais, Forças atrativas e repulsivas, Reconhecimento molecular, Natureza das interações, Interações fracas, Universalidade das forças de London, Energia de interação, contribuição das forças de London.		
<b>Fatos, dados, exemplos, substâncias exemplares</b>			
<b>Princípios</b>			
<b>CATEGORIZAÇÃO</b>			
<b>FRAGMENTO DO ARTIGO</b>	<b>ANÁLISE</b>	<b>CONCEITOS EM DESTAQUE</b>	<b>PERCEPÇÃO</b>
<p>Nossas ideias atuais de interação entre substâncias químicas surgiram ao longo dos séculos. Em 1743, Clairault imaginou forças interpartículas entre água e vidro e entre partículas de água para explicar o aumento capilar da água em um estreito tubo de vidro.</p> <p>A ideia de que as propriedades da matéria estavam relacionadas à interação entre átomos ou moléculas começou a surgir no século XIX com a derivação da equação de estado ideal do gás.</p>	<p>Mesmo em outros materiais da literatura, o conceito de capilaridade sempre surge como início para as primeiras ideias relacionadas às interações entre moléculas. No livro “Cohesion”, J. S. Rowlinson, sobre a história científica das forças intermoleculares, também aborda as tentativas de explicações para o fenômeno da capilaridade. Essas forças adesivas entre o líquido e o as paredes do capilar forem mais fracas do que as forças coesivas do próprio líquido, o líquido no capilar foge das paredes.</p> <p>A Equação de estado de um gás ideal descreve totalmente o comportamento de um gás ideal, pois relacionam suas três variáveis (P, V e T) para qualquer quantidade de matéria. A equação é uma combinação das leis de Boyle e Charles. O texto considera que, a partir da equação, foi possível perceber a relação entre propriedades da matéria e interação entre as partículas.</p>	<p>Interpartículas</p> <p>Capilaridade</p> <p>Equação de estado</p>	
Em 1873, J. van der Waals, depois de estudar um número de gases reais que exibiram desvio da equação do gás ideal sob certas condições, modifica a equação de estado.	Em 1873, J. D. van der Waals introduziu a primeira equação de estado derivada pela pressuposição de um volume finito ocupado pelas moléculas		



<p>O parâmetro <b>a</b> relaciona-se com a força de interações atrativas intermoleculares e <b>b</b> relaciona-se ao volume efetivo das esferas (interações repulsivas). Van der Waals considerou átomos ou moléculas de gases reais como sendo esferas duras que possuíam certas extensões no espaço (não pontos de massa) e até mesmo espécies neutras atraíam cada uma delas a longo alcance.</p>	<p>constituíntes. A partir de estudos com gases reais que apresentaram desvios no comportamento, propõe modificações na equação, atribuindo parâmetros de interações atrativas e repulsivas.</p>	<p>Desvio da idealidade</p>	<p>HISTÓRIA DAS INTERAÇÕES NÃO COVALENTES</p>
<p>Reinganum (1903), Debye (1912) e London (1927) contribuíram para uma melhor compreensão das forças intermoleculares. Reinganum tentou relacionar as interações com a estrutura das moléculas, propondo a presença de um "dipolo" (um par de cargas opostas separadas por constantes distâncias rigidamente localizadas dentro de uma molécula). Isso foi reforçado pelas investigações iniciais de Debye sobre dipolos permanentes. Logo ficou claro que nem todas as moléculas tinham dipolos permanentes.</p> <p>A publicação de London sobre a ligação covalente na molécula de H<sub>2</sub> levou a uma compreensão da ligação química dentro desta molécula e as forças repulsivas que operam a curtas distâncias. Depois disso, London também forneceu a primeira teoria das interações atrativas de longo alcance (conhecidas como forças de London) usando a mecânica quântica.</p>	<p>Os trabalhos de Reinganum (1903), Debye (1912) e London (1927) contribuíram para uma melhor visualização da relação das interações intermoleculares com a própria estrutura das moléculas. As investigações de Debye sobre a presença de dipolos permanentes em algumas moléculas. Forças de London, teoria das interações atrativas de longo alcance.</p>	<p>Dipolo Forças atrativas e repulsivas</p>	
<p>A presença de uma ligação fraca entre certas moléculas, envolvendo hidrogênio (ligações de hidrogênio), foi proposta em 1919 e 1920.</p>	<p>Interações fracas que envolvem hidrogênio, em certas moléculas, foi proposta por volta de 1920, às chamadas ligações de hidrogênio.</p>	<p>Ligação fraca</p>	

Em toda a matéria, quando átomos, íons ou moléculas (da mesma substância ou de substâncias diferentes) se aproximam a ~1nm, haverá sobreposição negligenciável de nuvens de elétrons.	Ocorre a sobreposição de nuvens de elétrons quando átomos, íons ou moléculas das substâncias estão a aproximadamente 1 nm.	Sobreposição de nuvens	NATUREZA DAS INTERAÇÕES NÃO COVALENTES
Os vários tipos de interações não covalentes são: (i) íon-íon, (ii) íon-dipolo, (iii) íon-dipolo induzido, (iv) dipolo-dipolo (v) dipolo-dipolo-induzido (vi) forças de dispersão de London (interações dipolo induzido-dipolo induzido), (vii) interações de ligação de hidrogênio e (viii) complexos de transferência de carga. As interações não covalentes entre substâncias sem carga líquida (iv - vi) são frequentemente denominadas forças de van der Waals. A natureza e a extensão das interações não covalentes (i - viii) são determinadas pelo tipo de espécies que interagem.	As interações não covalentes que são denominadas como forças de van der Waals são: dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido e forças de dispersão de London (dipolo induzido-dipolo induzido).	Forças de van der Waals	
A energia de interação depende da natureza das espécies envolvidas, sua orientação relativa e sua separação.	O texto apresenta a ideia de que a energia de interação entre as moléculas é dependente das espécies envolvidas, da orientação relativa das mesmas e a distância entre as espécies químicas.	Energia de interação	
As interações acima também podem ser caracterizadas como fracas ou interações não covalentes fortes. Interações fracas são aquelas que podem ser interrompidas pela energia cinética térmica do sistema e são transitórias (vida $10^{-12}$ s) na natureza.	As interações fracas são classificadas no texto como transitórias e podem ser facilmente interrompidas do ponto de vista energético.	Interações fracas	
Forças de dispersão de London (dipolo induzido-dipolo induzido) ocorrem em todas as substâncias.	Universalidade das forças de London é apresentada na tabela que traz a natureza das interações não covalentes.	Forças de dispersão de London	

<p>Um dos principais objetivos da educação química é ensinar os alunos a entender a relação entre estrutura molecular ou composição da matéria e suas propriedades.</p>	<p>As interações intermoleculares podem ser um dos melhores tópicos para a compreensão da relação entre estrutura molecular da matéria e suas propriedades.</p>	<p>Estrutura molecular</p>	<p>INTERAÇÕES NÃO COVALENTES NO CURRÍCULO DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA</p>
<p>O capítulo sobre propriedades de soluções descreve a influência da natureza dos solutos e solventes na dissolução com alguns exemplos típicos. O capítulo inclui o efeito de solutos em propriedades coligativas de solventes de um modo quantitativo sem investigar a natureza de interações soluto-solvente que levam às propriedades coligativas.</p>	<p>Os diferentes conteúdos de química em que poderiam ser abordadas as interações intermoleculares, teoria cinética dos gases, dissolução de sais, propriedades coligativas, propriedades dos compostos orgânicos, bioquímica.</p>	<p>Natureza das interações Propriedades</p>	
<p>Em conclusão, os conceitos de interações não covalentes são incluídos de forma esporádica em vários conteúdos de química, mas o panorama da natureza do reconhecimento molecular através de interações fracas não covalentes, universalidade (quando qualquer substância entra em contato com qualquer outra substância) e a significância de sua fraqueza ou natureza transitória não são retratados no currículo.</p>	<p>A conclusão levanta uma percepção de ausências de conceitos relacionados às interações intermoleculares em sua abordagem no currículo de graduação em química.</p>	<p>Reconhecimento molecular</p>	

## APÊNDICE B – Roteiro de Entrevistas

### 1) Apresentação da pesquisa e objetivos da entrevista.

Pedido de autorização para gravação. Avisar que o entrevistado não será identificado no trabalho.

### 2) Identificação do entrevistado

Nome, área de atuação, tempo de docência

#### A. A estrutura do tema

3) Qual a importância do tema interações intermoleculares para a sua área de pesquisa?  
(Por que este tema é importante na química de uma maneira geral?)

4) Você trabalha com este tema em um nível mais profundo do que se estuda no nível superior? Que diferenciação poderia ser feita?

5) O que você acha fundamental que um químico saiba sobre interações intermoleculares (um químico não pode sair do curso sem saber)?

(ver se sai uma diferenciação entre abordagem mais quantitativa e mais qualitativa sobre o tema)

6) Quais seriam os principais/ mais importantes **conceitos** envolvidos neste tema? Ideias chaves, pontos fundamentais. (listar os conceitos)

O entrevistador vai anotando os conceitos em uma folha a parte. Depois mostra a lista para o entrevistado e pergunta:

6.1) Tem mais algum conceito que está faltando?

6.2) Dentre os **conceitos** citados quais são os **centrais** (mais importantes)? Por quê? (aqueles cuja compreensão é fundamental)

6.3) Quais são as principais relações existentes entre esses conceitos que você citou?

(Na medida do possível ver se o entrevistado define os conceitos, principalmente os centrais.)

(ver se sai algum conceito sobre propriedades moleculares: polaridade, momento de dipolo, polarizabilidade, geometria, volume molecular, etc.)

7) O que você considera mais difícil para o aluno aprender?

#### B. O tema nas disciplinas ministradas

8) Quais disciplinas ministra? Para qual curso? Quanto tempo?

9) O tema é abordado nessas disciplinas? Como é abordado? O que é apresentado? (O que você normalmente ensina sobre interações intermoleculares?)

10) Tem algum exemplo de um bom fenômeno ou processo para se discutir este tema? (através do qual se pode – serve para- aprender interações intermoleculares)

#### C. O tema no currículo

11) No curso de química (IQ ou geral) você sabe como esse tema está inserido no currículo? Concorda ou não com isto? (Lembra do curso que fez? Como foi o aprendizado deste tema?)

12) Como você acha que o tema deveria ser organizado na grade curricular de um curso de química? Por quê?

### APÊNDICE C – Análise das Entrevistas a partir dos conteúdos conceituais

Princípios	Contexto (entrevista)	Conceitos relacionados	Proposição
Onipresença do tema	P: Eu acho que é um tema que está espalhado pela química de forma meio que horizontal. ...eu acho que interações intermoleculares são importantes para química de forma geral.	Química	(21)
	R: Sim. É que ele é... tema meio negligenciado na verdade...		
	R: Mais recorrente e em mais de uma disciplina porque são conceitos que perfazem a química em diferentes áreas... não é porque o cara é um químico orgânico que ele precisa esquecer a Termodinâmica dele... entropia, entalpia, porque os conceitos vão reaparecer... não é porque ele é um orgânico sintético que ele precisa esquecer isso...	Termodinâmica	
Simplificação do tema	E tem que ter a noção de que não é semelhante que dissolve semelhante, mas eu acho que ele tem que ser capaz de fazer uma análise um pouco mais crítica disso que em geral a pessoal aprende suponho no ensino fundamental?	Solubilidade	(19)
	R: Ai às vezes isso é... claro que você pode dizer ah um é... você sempre pode dizer ah o óleo é apolar a água é polar, então, pronto, não se misturam... mas eu acho que o químico deveria ter uma interpretação mais molecular disso.	Polaridade	
Visão molecular	P: Então, eu acho que o químico tem que ter uma interpretação mais molecular e, até atômica dos fenômenos, pode ser fenomenológica, não precisa necessariamente ser muito quantitativa, embora eu ache que você ter noções quantitativas e saber trabalhar com modelos matemáticos, eu acho que é...	Químico	
Interdisciplinaridade	. Mas eu acho que sim também porque aí você faz ponte com físico-química, por exemplo, na hora que você faz ponte entre uma matéria e outra, e você interliga as coisas, eu acho que o aluno aprende de forma mais melhor. Na hora em que ele consegue fazer uma interligação entre aquilo que você está vendo em uma disciplina e o que ele viu na outra.		
Fato	Contexto (entrevista)	Conceitos relacionados	Proposição
Propriedades da água	R: Não, eu tô pensando se a água... se existe algum conceito que se relaciona... conceito relacionado às propriedades da água... mas na verdade as propriedades da água saem dessas coisas todas	Água	
	...o funcionamento da célula depende de interações intermoleculares...	Célula	

	Às vezes é algo meio abstrato mas você tem que tocar em efeito hidrofóbico. Colocar aqui ó?! Que essencialmente explica porque óleo e água não se misturam.	Óleo	
Ligação de hidrogênio	Você vai analisar uma estrutura cristalográfica aí cê vê uma carbonila próxima de um NH... será que essa é uma ligação de hidrogênio? Entendeu?	Estrutura cristalográfica	
<b>Conceitos</b>	<b>Contexto (entrevista)</b>	<b>Conceitos relacionados</b>	<b>Proposição</b>
Interações intermoleculares	... estrutura tridimensional de de macromoléculas de interesse biológico, ou seja, proteínas, no meu caso específico, mas também você pode considerar ácidos nucleicos... açúcares... hum... é determinada por interações intermoleculares...	Macromoléculas Estrutura tridimensional	(1)
	compreender as interações intermoleculares... especificidade, falta de especificidade, cooperatividade, (incompreensível 03: 23),... todos esses fenômenos são são envolvem interações intermoleculares.	Especificidade Cooperatividade	(2)
	Quer dizer... célula, o funcionamento da célula depende de interações intermoleculares... desde a estrutura da membrana até o funcionamento das moléculas que estão lá dentro...	Célula	(3)
	Dentro da química eu acho que se o cara quer entender... se a pessoa que entender solubilidade... tem que entender interações intermoleculares, né? Ou seja, você tem que olhar a solubilidade do ponto de vista de interações intermoleculares do soluto com o solvente, do soluto com o soluto, e solvente com o solvente... e isso é muito pouco... os alunos não tem muita noção disso... normalmente... tá?	Solubilidade Solutu-solutu Solvente-solvente Solutu-solvente	(4) e (5)
	R: Claro. É um tema relacionado com solubilidade, mas tem tudo a ver com interações intermoleculares e é <b>fundamental em bioquímica.</b>	Solubilidade	(10)
	eu acho que um cara que esteja trabalhando com materiais também precisa entender interações porque ele vai trabalhar com ligas metálicas um cara trabalhando com líquidos iônicos também precisa... acaba se deparando com questões que relacionadas a interações intermoleculares...	Materiais Líquidos iônicos	(6)
	a pessoa trabalhando com química teórica você quer calcular a propriedade espectroscópica de uma molécula? Bom você quer calcular propriedades no estado gasoso porque você vai comparar com medidas espectroscópicas que você faz no vapor ou vácuo ou em solução... né... então você tem que ter uma noção de interações intermoleculares, acho que é fundamental. Trabalha-se muito com complexos em química não é? Formação de complexos...	Química teórica Espectroscopia Complexos	(6)

	tem que saber diferenciar interações fracas de interações covalentes, colocando ligação de hidrogênio e interações eletrostática aí no meio, tá?	Interações fracas Interações covalentes Interações eletrostáticas	(7)
	É quando você fala em interações intermoleculares você tem que resgatar e lembrar ao aluno o que que é delta G, delta H, delta S de novo porque eles devem ter visto isso em físico-química	dG dS dH	(8)
	Ahhh... uma coisa que eu não comentei aqui, mas eu sempre falo para eles quando falo sobre interações intermoleculares é efeito hidrofóbico.	Efeito hidrofóbico	(9)
	É um tema relacionado com solubilidade, mas tem tudo a ver com interações intermoleculares e é fundamental em bioquímica.	Bioquímica	(10)
	talvez não seja a melhor forma para o conceito ficar consolidado na cabeça deles. Pra mim, por exemplo, eu demorei pra entender o que era entropia, ter uma noção melhor, então é sempre bom discutir essas coisas, porque não são conceitos muito triviais. Eu acho que é sempre bom retomar.	Entropia	
	Entendeu, eu acho que foi aí a primeira vez que eu ouvi falar em interações intermoleculares. Paulo Tang. Tá?! Falando sobre gases ideais e gases não ideais. Falou sobre isso. E, me lembro que deu um exercício pra gente fazer em que a gente tinha que interpretar aqueles parâmetros a e b da equação de Van Der Waals que foi bem complicado porque a gente tinha que ir na biblioteca pesquisar, estudar, etc... entendeu? Paulo Tang.	Gases ideais	(11)
Reconhecimento molecular	Olha tem um fenômeno muito importante que (40: 00) é reconhecimento molecular, bom, em bioquímica é fundamental, né? Mas eu acho que em outras áreas da química também. Reconhecimento intermolecular depende de interações intermoleculares. Não sei agora que outros exemplos eu poderia tirar...	Interações Bioquímica	(9)
Polarizabilidade	Não, raio atômico é importante porque na hora em que você vai discutir interações de Van Der Waals, você vai acabar falando em tamanho de átomos ou você vai discutir polarizabilidade que tem uma certa correlação com o tamanho do átomo...	Raio atômico Tamanho dos átomos Interações de van der Waals	(12)
Momento de dipolo	Momentos de dipolo da molécula, que, de vez em quando pode estar relacionada com a geometria também... se ela é muito simétrica...	Geometria Simetria	(13)
	Interação entre cargas ou entre dipolos e em monopólos... eu acho que sim...	Cargas	
	F: Eu tô falando agora que seria polaridade, polarizabilidade, geometria e o momento dipolo... momento dipolo então tá ligado à	Propriedades moleculares	(13)

	polaridade... são essas as propriedades moleculares fundamentais?... R: Sim, eu acho que sim.		
Ligação de hidrogênio	Você vai analisar uma estrutura cristalográfica aí cê vê uma carbonila próxima de um NH... será que essa é uma ligação de hidrogênio? Entendeu? Bom aí você tem que ter na tua cabeça mais ou menos quais são as distâncias típicas e o ângulo de uma ligação de hidrogênio... entendeu?	Ângulo de ligação Distância de ligação	(14)
	F: ...quais seriam os conceitos que você acha que são importantes... R: O que que é uma interação covalente... uma ligação covalente? Um conceito... o que que é uma ligação de hidrogênio? O que são as forças de Van Der Waals? Eu acho que isto são conceitos.	Ligação covalente Ligação de hidrogênio Forças de van der Waals	(7)
	R: Porque energia eletrostática é uma forma de energia potencial. F: Se relaciona com o que disse aqui que você falou? R: Se relacionaria com interação iônica ou com <b>ligação de hidrogênio</b> até com caráter iônico. Ah... que mais? Estrutura molecular?	Energia eletrostática	(15)
	R: Ajuda, eu acho que ajuda... claro que você pode explicar e falar para eles olha... sei lá... moléculas que formam ligações de hidrogênio vão se dissolver melhor em água do que em solventes orgânicos porque enfim podem formar interações... mas... os conceitos que você usa... pode acabar utilizando estes conceitos...		(16)
Estrutura molecular	a gente trabalha muito com aspectos mecanísticos de fenômenos biológicos do ponto de vista estrutural e aí você está falando em interações... intermoleculares... então tudo se baseia em compreender as interações intermoleculares...	Fenômenos Interações	
	célula, o funcionamento da célula depende de interações intermoleculares... desde a estrutura da membrana até o funcionamento das moléculas que estão lá dentro...	Célula	(3)
	Você vai analisar uma estrutura cristalográfica aí cê vê uma carbonila próxima de um NH... será que essa é uma ligação de hidrogênio? Entendeu?	Tipo de interação	
	R: Porque energia eletrostática é uma forma de energia potencial. Se relacionaria com interação iônica ou com ligação de hidrogênio até com caráter iônico. Ah... que mais? Estrutura molecular? F: A ideia de estrutura molecular mas não tão... talvez... explícita ou implícita? R: Não... geometrias...	Energia eletrostática Geometria molecular	
Energia	uma abordagem mais quantitativa é você propor pro aluno exercícios onde ele tenha que calcular uma energia de interação, um	Abordagem quantitativa Energia de interação	(16)



	delta G, com base em... sei lá... em dados que você dá. Por exemplo, se é uma interação eletrostática você diz: oh o potencial eletrostático tem essa forma, a carga da molécula A é X, da molécula B é Y. Qual que é a energia de interação entre elas? Qual que seria a constante de afinidade entre uma molécula e outra? Supondo que a interação seja eletrostática... essa é uma forma.		
	É eu acho que é uma maneira de pensar quantitativamente, outra maneira de pensar quantitativamente é você ter na cabeça aquelas tabelas que a gente já discutiu com valores de energia de interação.	Valores tabelados	(17)
	Outro aspecto quantitativo é você entender o que é o potencial de Lennard-Jones	Lennard-Jones	(18)
	De onde vem essa expressão? Entender, olhar a equação e saber interpretar a equação, não necessariamente derivar, e interpretar. O que ela quer dizer? Entendeu? Eu acho que isso... eu considero... eu acho que isso... é... essa abordagem... é a abordagem quantitativa para mim.	Equação	
	F: Energia potencial por quê? R: Porque energia eletrostática é uma forma de energia potencial. F: Se relaciona com o que disse aqui que você falou? R: Se relacionaria com interação iônica ou com ligação de hidrogênio até com caráter iônico. Ah... que mais? Estrutura molecular?	Tipo de interação Estrutura	
	Por exemplo, se é uma interação eletrostática você diz: oh o potencial eletrostático tem essa forma, a carga da molécula A é X, da molécula B é Y. Qual que é a energia de interação entre elas? Qual que seria a constante de afinidade entre uma molécula e outra? Supondo que a interação seja eletrostática... essa é uma forma.	Potencial eletrostático	
	tem que ter uma noção de quais são pelo menos os principais tipos de interação que ocorrem... qual é a importância energética dos diferentes tipos de interação...	Tipo de interação	
Polaridade	tentar levantar quais seriam os conceitos que você acha que são importante... R: O que que é uma interação covalente... uma ligação covalente? Um conceito... o que que é uma ligação de hidrogênio? O que são as forças de Van Der Waals? Eu acho que isto são conceitos. Eu acho que polaridade é um outro conceito. Raio atômico. Interação eletrostática.	Interações intermoleculares	
	Tem que entender o que são compostos apolares, que tipo de interações eles podem fazer, diferenciar isso de compostos iônicos	Tipo de interação	

	(10: 00) e que tipo de interações eles podem fazer.		
	R: Ai às vezes isso é... claro que você pode dizer ah um é... você sempre pode dizer ah o óleo é apolar a água é polar, então, pronto, não se misturam... mas eu acho que o químico deveria ter uma interpretação mais molecular disso.	Polaridade	<b>(19)</b>
Raio atômico	Eu acho que isto são conceitos. Eu acho que polaridade é um outro conceito. Raio atômico. Interação eletrostática.	Polaridade	
	Não, raio atômico é importante porque na hora em que você vai discutir interações de van der Waals, você vai acabar falando em tamanho de átomos ou você vai discutir polarizabilidade que tem uma certa correlação com o tamanho do átomo... então é um conceito que acaba aparecendo...	Interações de van der Waals Tamanho dos átomos Polarizabilidade	
Químico	P: Então, eu acho que o químico tem que ter uma interpretação mais molecular e, até atômica dos fenômenos, pode ser fenomenológica, não precisa necessariamente ser muito quantitativa, embora eu ache que você ter noções quantitativas e saber trabalhar com modelos matemáticos, eu acho que é...	Interpretação dos fenômenos	
	P: Olha você usa modelagem em vários campos da ciência... da ciência... e da vida... quer dizer, você vai usar modelagem em questões... para estudar questões financeiras, engenharia, biologia, química, em tudo, então, eu acho que saber trabalhar com modelos matemáticos ou ter uma noção é importante, assim como, ter uma noção de... um pouco mais profunda de computação, atualmente, eu acho que é importante... porque eu tenho a impressão que técnicas talvez de simulações computacionais vão ficar cada vez mais e mais importantes (12: 00) tanto a nível tecnológico quanto científico considerando que os computadores vão ficar cada vez mais velozes não é?	Modelagem molecular Simulação computacional	<b>(20)</b>
	P: Não é que a Química vai caminhar para isso, mas essas... vão ser importantes.	Química	
Abordagem quantitativa	Eu diferencio da seguinte forma: uma abordagem mais quantitativa é você propor pro aluno exercícios onde ele tenha que calcular uma energia de interação, um delta G, com base em... sei lá... em dados que você dá.	Cálculos	
	outra maneira de pensar quantitativamente é você ter na cabeça aquelas tabelas que a gente já discutiu com valores de energia de interação.	Energia de interação	<b>(17)</b>
	Outro aspecto quantitativo é você entender o que é o potencial de Lennard-Jones	Potencial	<b>(18)</b>
	R: Pra eles?... Pra eles entenderem?... Eu acho que tem dois probleminhas aí... um dos problemas que eu tive quando eu		

	mostrei alguma equação para eles... eu acho que as pessoas... alguns alunos tem alergia... o cara vê a equação... ele desliga...		
Interdisciplinaridade	. Mas eu acho que sim também porque aí você faz ponte com físico-química, por exemplo, na hora que você faz ponte entre uma matéria e outra, e você interliga as coisas, eu acho que o aluno aprende de forma mais melhor. Na hora em que ele consegue fazer uma interligação entre aquilo que você está vendo em uma disciplina e o que ele viu na outra.	Química	(20)
	R: É ó tá vendo... quer dizer... são questões que você aprende em Química Geral mas por que não resgatar isso em outros cursos...		
Abordagem qualitativa	Eu acho que o curso, a abordagem do curso de Química sempre foi mais qualitativa, pelo menos no curso que eu fiz, e aí durante a minha carreira científica aí fui lendo coisas e eu fui vendo outras abordagens, mas historicamente eu acho que a abordagem num curso de Química sempre foi mais qualitativa... isso talvez se deva à constituição da pesquisa no instituto, não sei...	Química	
	R: Né? Então por exemplo o curso de química aqui eu acho que aborda pouco termodinâmica estatística, eu tenho a impressão que nos EUA eles abordam mais (20: 00)... Pelo o que eu vi ali...	Termodinâmica	
	R: Eu acho que o conceito de entropia é difícil, o conceito de energia livre não é tão simples, tá?! Eu acho que às vezes o conceito de forças de Van Der Waals é abstrato também. Eu acho que ela é um conceito abstrato, né?! (34: 00)... eu acho que aqueles tipos de interação que a gente classifica muitas vezes são questões abstratas... talvez seja por isso que seja difícil pra eles pensarem... pelo menos pra mim parecia abstrato, né?!	Forças de van der Waals Entropia	
Fenômeno	R: Ahhh... uma coisa que eu não comentei aqui, mas eu sempre falo para eles quando falo sobre interações intermoleculares é efeito hidrofóbico. Às vezes é algo meio abstrato mas você tem que tocar em efeito hidrofóbico. Colocar aqui ó?! Que essencialmente explica porque óleo e água não se misturam.	Efeito hidrofóbico	
Efeito hidrofóbico	efeito hidrofóbico... e aí vai ter uma tabelinha ali sobre a variação de entropia envolvida na solubilidade de alguns compostos apolares em água e tal... isso é duro de explicar... num curso de bioquímica... se as pessoas não tem toda uma base... no meu curso de química eu nunca ouvi falar em efeito hidrofóbico, eu ouvi falar em efeito hidrofóbico quando eu fiz iniciação científica, imagina, só?!	Entropia	(22)

## APÊNDICE D – Artigos da Categoria “Conceitos” analisados

1. Campanario, J. M., Bronchalo, E., Hidalgo, M. A. (1994). An Effective Approach for Teaching Intermolecular Interactions. *Journal of Chemical Education*. 71(9), 761-766. <https://doi.org/10.1021/ed071p761>.
2. Jasien, P. G. (2008). Helping Students Assess the Relative Importance of Different Intermolecular Interactions. *Journal of Chemical Education*. 85(9), 1222-1225. <https://doi.org/10.1021/ed085p1222>.
3. Farina, C., Souza R. M., Kort-Kamp W. J. M., Sigaud C. (2013). Image method in the calculation of the van der Waals force between an atom and a conducting surface. *American Journal of Physics*. 81(5), 366-376. <https://doi.org/10.1119/1.4798548>.
4. Holstein, B. R. (2001). The van der Waals interaction. *American Journal of Physics*. 69(4), 441-449. <https://doi.org/10.1119/1.1341251>.
5. Weinhold F., Klein R.A. (2014). What is a hydrogen bond? Resonance covalency in the supramolecular domain. *Chemistry Education Research and Practice*, 15, 276–285.
6. Rivera-Rivera L. A., Walton J. R., Lucchese R. R., Bevan J. W. (2017). Is there any fundamental difference between ionic, covalent, and others types of bond? A canonical perspective on the question. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19, 15864-15869. <https://doi.org/10.1039/C7CP02407J>.
7. Tsaparis, G., Finlayson, O. E. (2014). Physical chemistry education: its multiple facets and aspects. *Chemistry Education Research and Practice*, 15, 257-265.
8. Tsaparis, G. (2014). The logical and psychological structure of physical chemistry and its relevance to the organization/sequencing of the major áreas covered in physical chemistry textbooks. *Chemistry Education Research and Practice*, 15, 391-401.
9. Buckingham, A.D., Fowler, P.W., Hutson, J.M. (1988). Theoretical Studies of van der Waals Molecules and Intermolecular Forces. *Chemical Reviews*. 88(6), 963-988. <https://doi.org/10.1021/cr00088a008>.
10. Chalasinski, G., Gutowski, M. (1988). Weak Interactions between Small Systems. Models for Studying the Nature of Intermolecular Forces and Challenging Problems for ab Initio Calculations. *Chemical Reviews*. 88(6), 943-962. <https://doi.org/10.1021/cr00088a007>.
11. Taddei, M. M., Mendes, T. N. C., Farina C. (2010). An introduction to dispersive interactions. *European Journal of Physics*. 31(1), 89-99. <https://doi.org/10.1088/0143-0807/31/1/009>.
12. Zhu, R., Cui, S., Wang, X. (2010). Theoretical foundation of Zisman’s empirical equation for wetting of liquids on solid surfaces. *European Journal of Physics*, 31, 251–256.
13. Vega, P. R. D., Gracia-Fadrique, J. (2015). Van der Waals, más que una ecuación cúbica de estado. *Educación Química*, 26, 187-194.
14. Vela, A. (2016). Logros y perspectivas de la Química Teórica. *Educación Química*, 27, 278-285.
15. Coreño-Alonso, J., Méndez-Bautista, M. T. (2010). Relación estructura-propiedades de polímeros. *Educación Química*, 21(4), 291-299.
16. Struyf, J. (2011). An Analytical Approach for Relating Boiling Points of Monofunctional Organic Compounds to Intermolecular Forces. *Journal of Chemical Education*, 88, 937–943.
17. Murthy, P. S. (2006). Molecular Handshake: Recognition through Weak Noncovalent Interactions. *Journal of Chemical Education*. 83(7) 1010-1013. <https://doi.org/10.1021/ed083p1010>.
18. Letcher, T. M., Battino, R. (2001). An Introduction to the Understanding of Solubility. *Journal of Chemical Education*. 78(1), 103-111.
19. Glazier, S., Marano, N., Eisen, L. (2010). 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*. 87(12), 1336-1341. <https://doi.org/10.1021/ed100691n>.
20. Nichol, C. A., Szymczyk, A. J., Hutchinson, J. S. (2014). Data First: Building Scientific Reasoning in AP Chemistry via the Concept Development Study Approach. *Journal of Chemical Education*. 91, 1318–1325.
21. Friesen, J. B. (2014). Forensic Chemistry: The Revelation of Latent Fingerprints. *Journal of Chemical Education*, 92, 497–504.

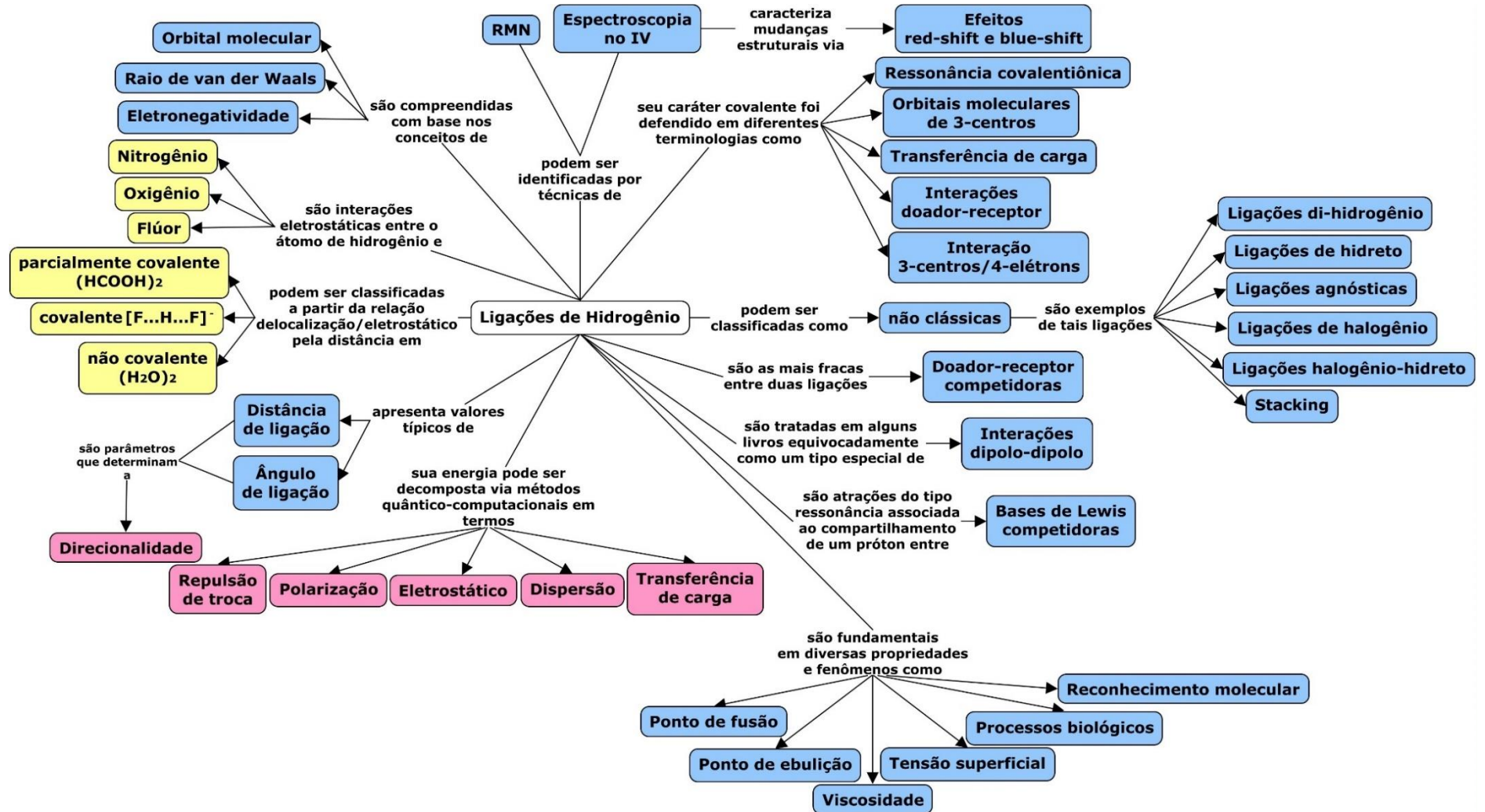
22. Hirschfelder, J. O., Roseveare, W. E. (1938). Intermolecular forces and the properties of gases. *The Journal of Physical Chemistry*. 43(1), 15-35. <https://doi.org/10.1021/j150388a003>.
23. Kollman, P. A. (1977). A General Analysis of Noncovalent Intermolecular Interactions. *Journal of the American Chemical Society*. 99(15), 4875-4894. <https://doi.org/10.1021/ja00457a002>.
24. Douglas, J.E., Kollman, P. A. (1980). A Model Equation for the Analysis of Noncovalent Intermolecular Interactions. *Journal of the American Chemical Society*. 102(13), 4295-4302. <https://doi.org/10.1021/ja00533a002>.
25. Williams, D. H., Westwell, M. S., Searle, M. S., Wales, D. J. (1995). *Journal of the American Chemical Society*, 117(18), 5013-5015.
26. Fowkes, F. M. (1963). Additivity of intermolecular forces at interfaces. i. Determination of the contribution to surface and interfacial Tensions of dispersion forces in various liquids. *The Journal of Physical Chemistry*. 67(12), 2538–2541. <https://doi.org/10.1021/j100806a008>.
27. Khaliullin R. Z., Cobar E. A., Lochan R. C., Bell A. T., Head-Gordon M. (2007). Unravelling the Origin of Intermolecular Interactions Using Absolutely Localized Molecular Orbitals. *The Journal of Physical Chemistry A*. 111(36), 8753-8765. <https://doi.org/10.1021/jp073685z>.
28. Silvestrelli, P. L. (2009). van der Waals Interactions in Density Functional Theory Using Wannier Functions. *The Journal of Physical Chemistry A*, 113, 5224–5234.
29. Zeinalipour-Yazdi, C. D., Pullman, D. P. (2006). Correlation of Polarizabilities with Van Der Waals Interactions in  $\pi$ -systems. *The Journal of Physical Chemistry B*, 110, 24260-24265.
30. Visser, S. P. (2011). van der Waals Equation of State Revisited: Importance of the Dispersion Correction. *The Journal of Physical Chemistry B*, 115, 4709–4717.
31. Stone, A. J., Price, S. L. (1988). Some New Ideas in the Theory of Intermolecular Forces: Anisotropic Atom-Atom Potentials. *The Journal of Physical Chemistry*. 92(12), 3325-3335. <https://doi.org/10.1021/j100323a006>.
32. Padday, J. F., Uffindell, N. D. (1968). The Calculation of Cohesive and Adhesive Energies from Intermolecular Forces at a Surface. *The Journal of Physical Chemistry*. 72(5), 1407–1414. <https://doi.org/10.1021/j100851a002>.
33. Del Pino, J. C., Silva, S. M., Eichler, M. L. (2003). As percepções dos professores de química geral sobre a seleção e a organização conceitual em sua disciplina. *Química Nova*, 26(4), 585-594.
34. Oliveira, B. G., Araújo, R. C. M. U. (2007). Relação entre transferência de carga e as interações intermoleculares em complexos de hidrogênio heterocíclicos. *Química Nova*, 30(4), 791-796.
35. Cougo-Pinto, M. V., Farina, C., Tort, A. (2000). O Efeito Casimir. *Revista Brasileira de Ensino de Física*. 22(1), 122-132.
36. Da Silva, D.C., Quadros, A.L., Rodrigues, S. B. V. (2011). O ensino superior de química: reflexões a partir de conceitos básicos para a química orgânica. *Química Nova*. 34(10), 1840-1845. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422011001000019>.
37. Oliveira, B.G., Araújo, R. C. M. U. (2012). SAPT: ligação de hidrogênio ou interação de van der Waals?. *Química Nova*. 35(10), 2002-2012. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422012001000021>.
38. Martins, C. R., Lopes, W. A., Andrade, J. B. (2013). Solubilidade das substâncias orgânicas. *Química Nova*, 36(8), 1248-1255.
39. Zheng, L., Du, J. (2018). A nonextensive approach for understanding the van der Waals' equation. *European Journal of Physics*. 39, 1-8. <https://doi.org/10.1088/1361-6404/aad877>.
40. PECKHAM, G. D.; McNAUGHT, I. J. (2012). Teaching Intermolecular Forces to First-Year Undergraduate Students. *Journal of Chemical Education*, v. 89, p. 955-957.
41. DEAN, P. A. W. (2014). Facets of van der Waals Radii That Are Not Commonly Included in Undergraduate Textbooks. *Journal of Chemical Education*, 91(1), 154–157.
42. GOTTSCHALK, E.; VENKATARAMAN, B. (2014). Visualizing Dispersion Interactions. *Journal of Chemical Education*. v. 91, n. 5, p. 666–672.







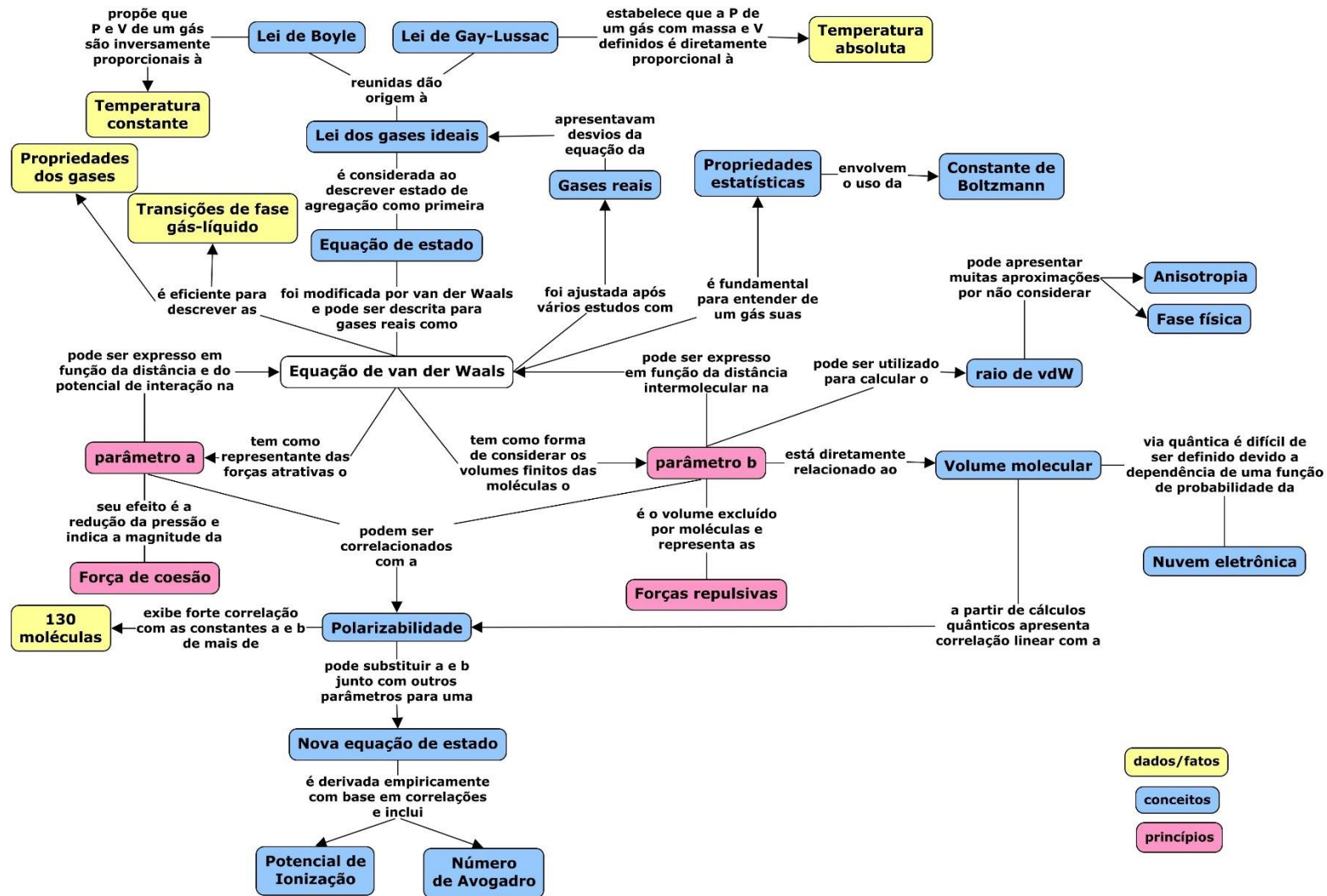
Mapa Conceitual sobre energia de ligações de hidrogênio extraído da análise dos artigos da pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

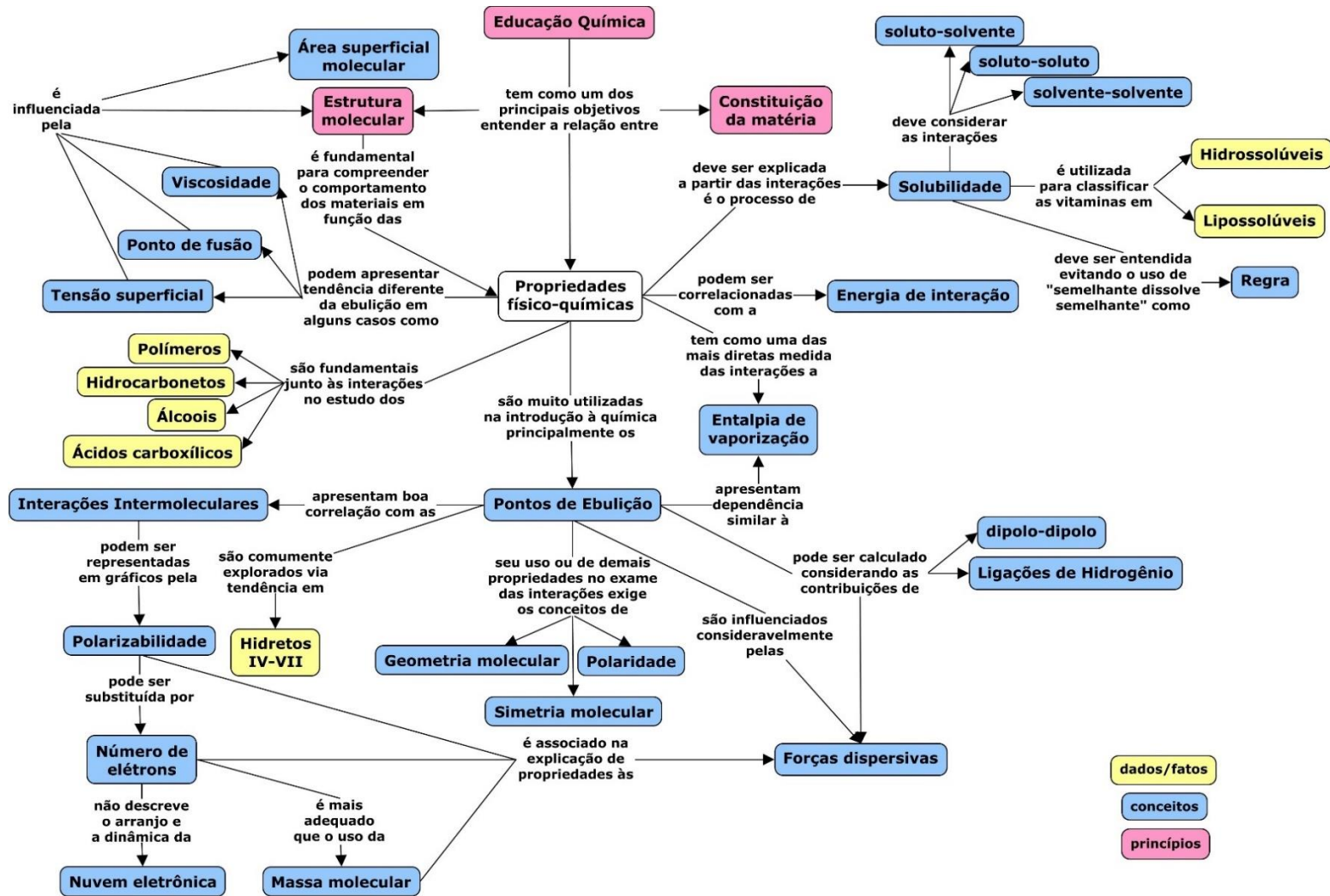


Mapa Conceitual sobre equação de van der Waals extraído da análise dos artigos da pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

Mapa Conceitual sobre propriedades físico-químicas extraído da análise dos artigos da pesquisa bibliográfica.



Fonte: autoria própria.

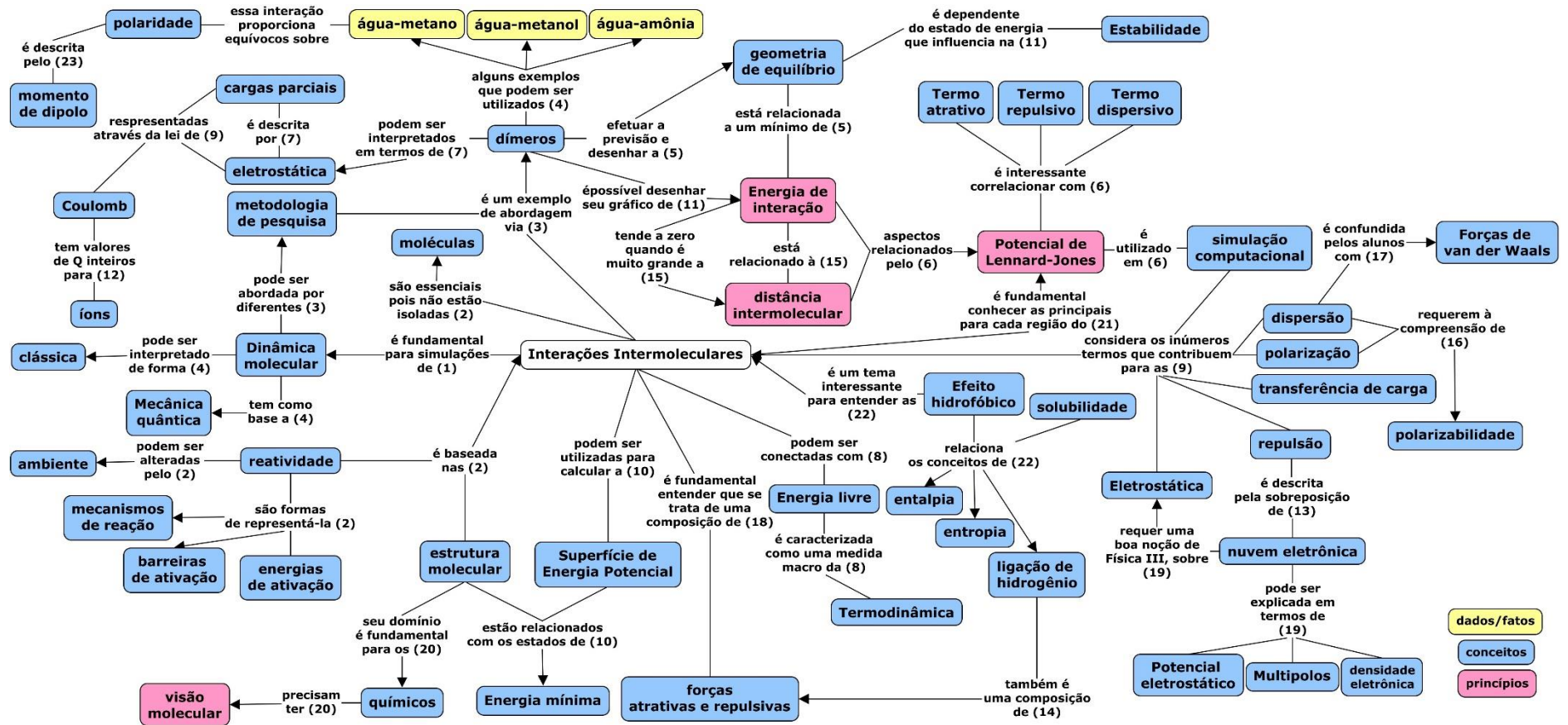








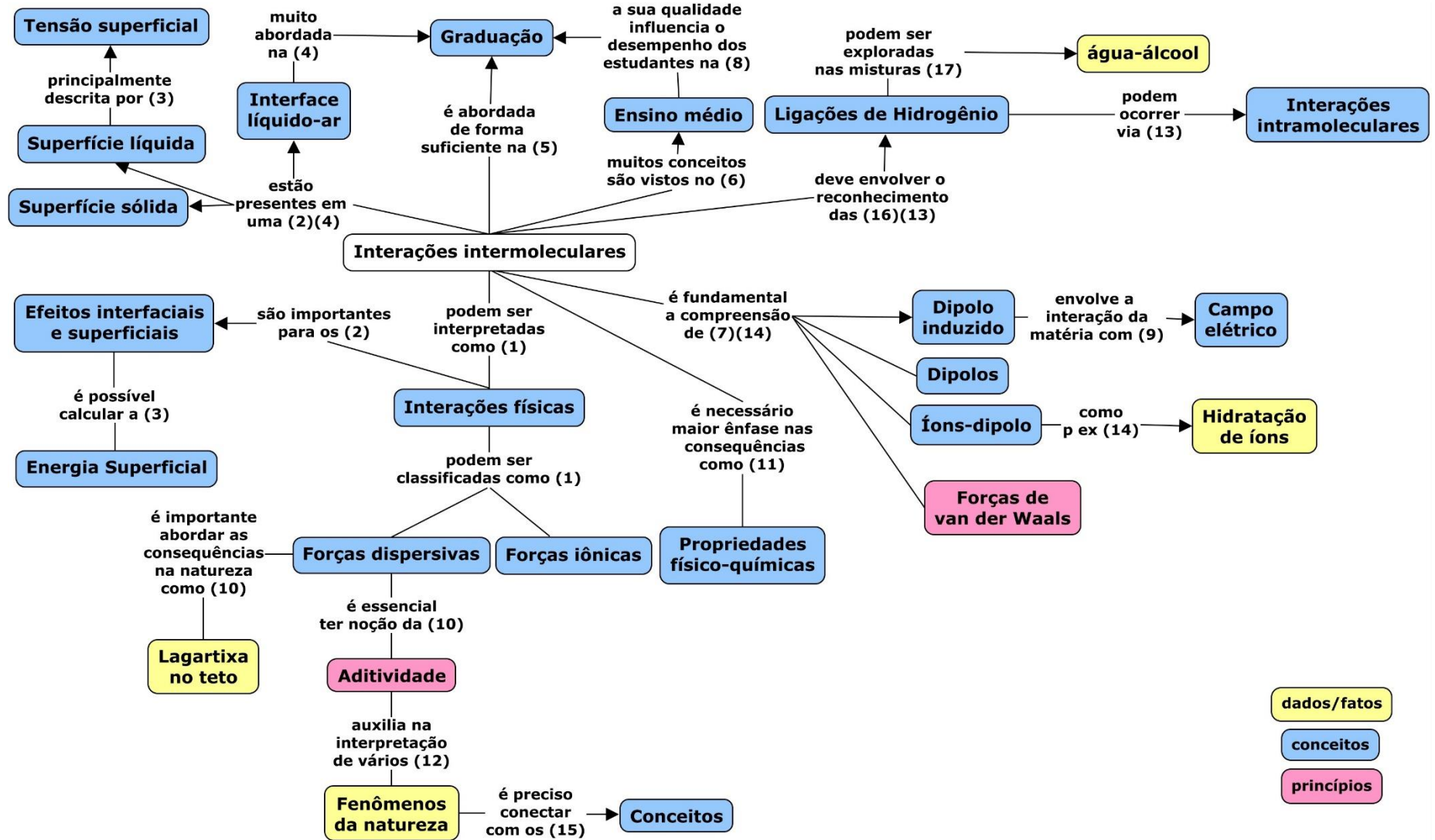
Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P4



Fonte: autoria própria.



Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P5



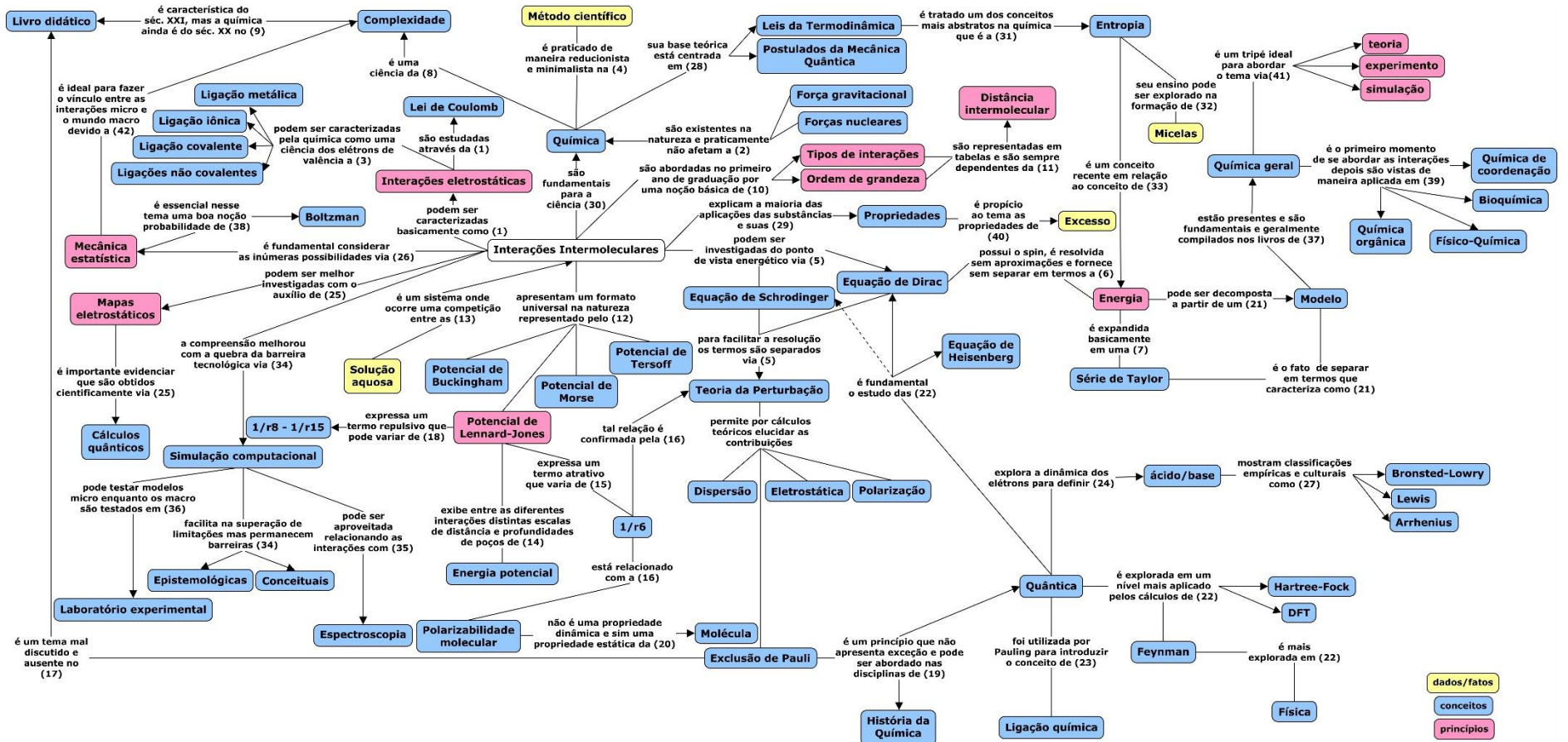
dados/fatos  
conceitos  
princípios

Fonte: autoria própria.



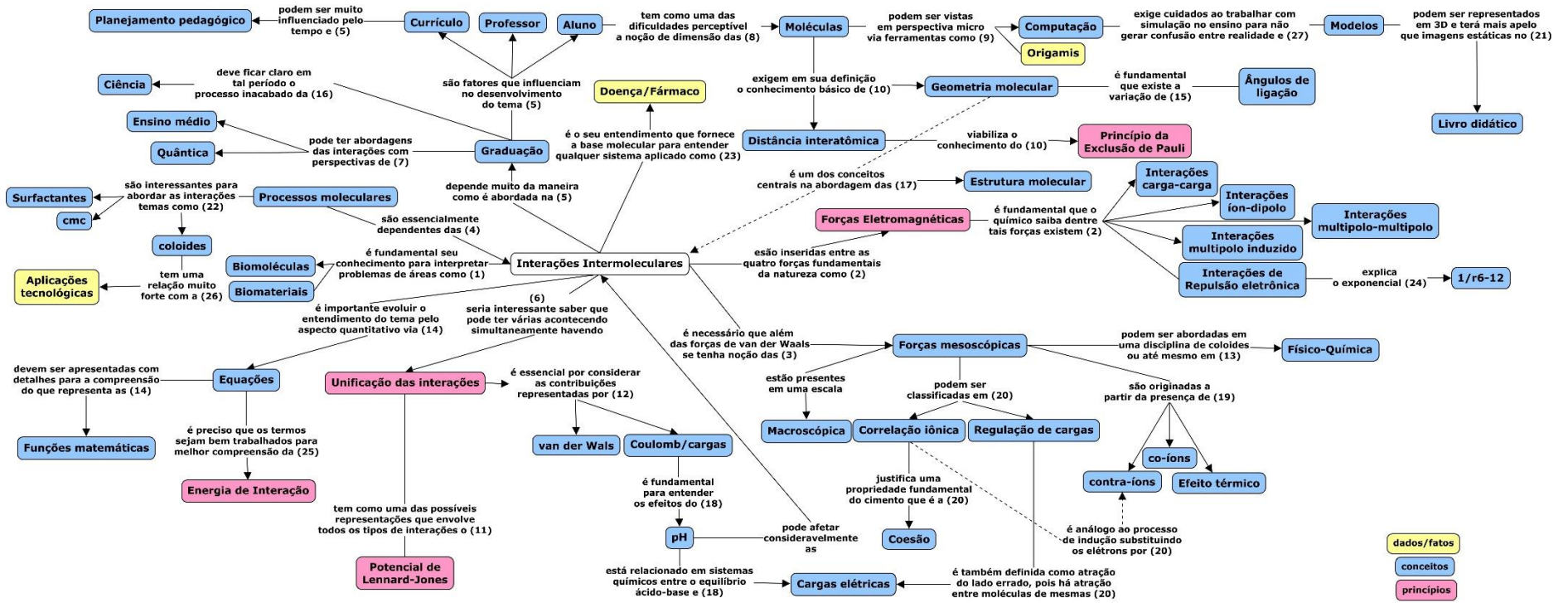


### Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P7



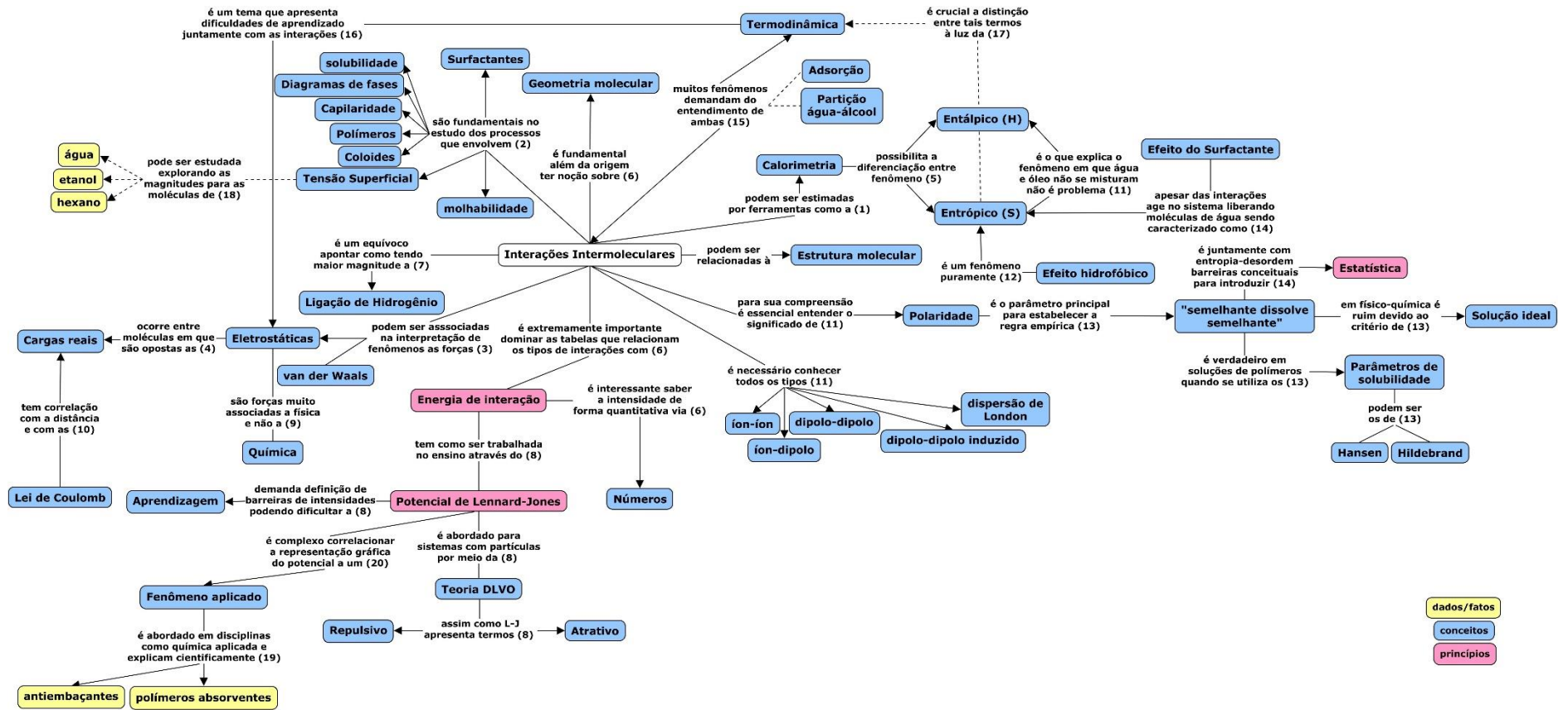
Fonte: autoria própria.

### Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P8



Fonte: autoria própria.

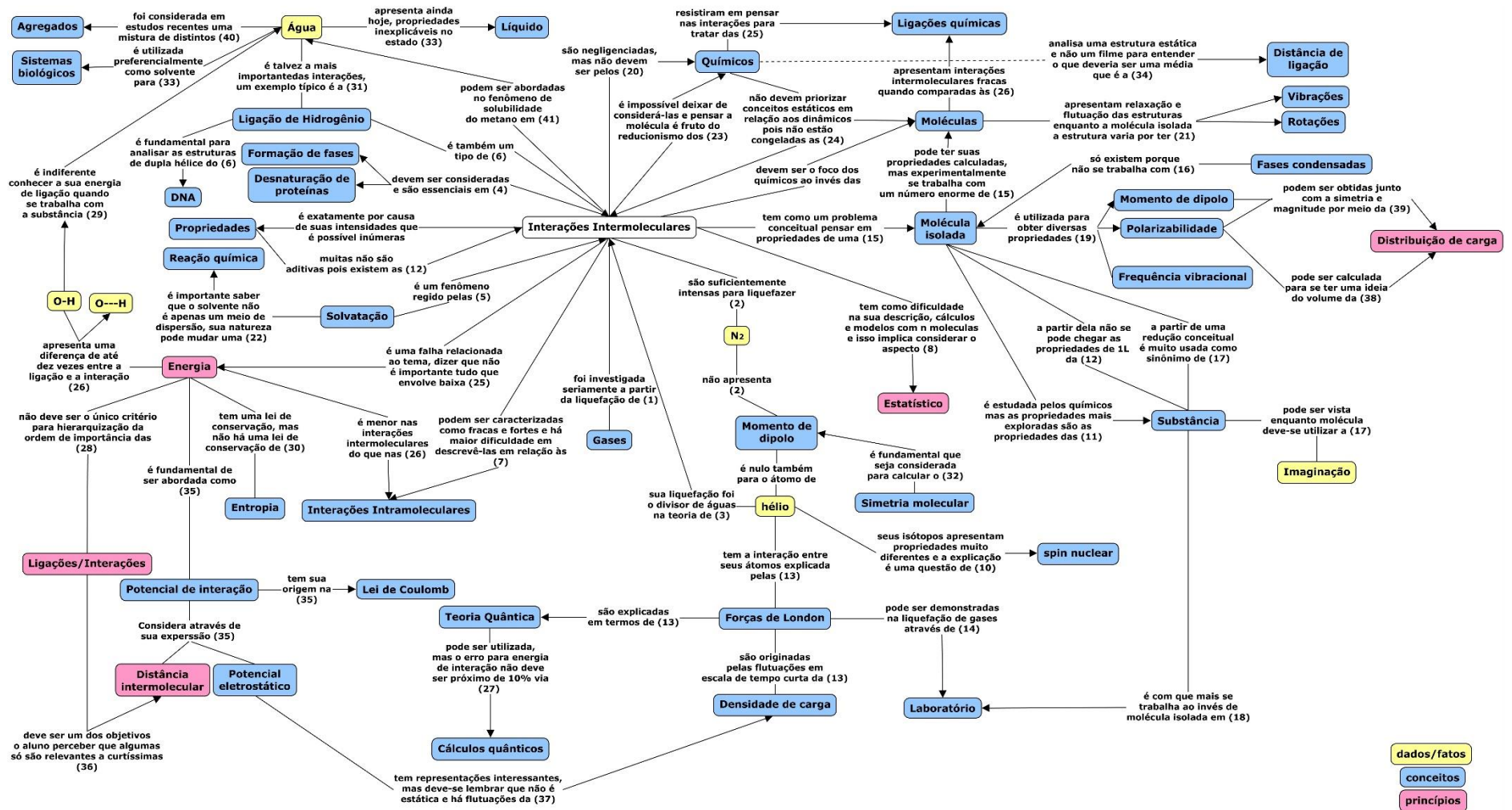
### Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P9



Fonte: autoria própria.

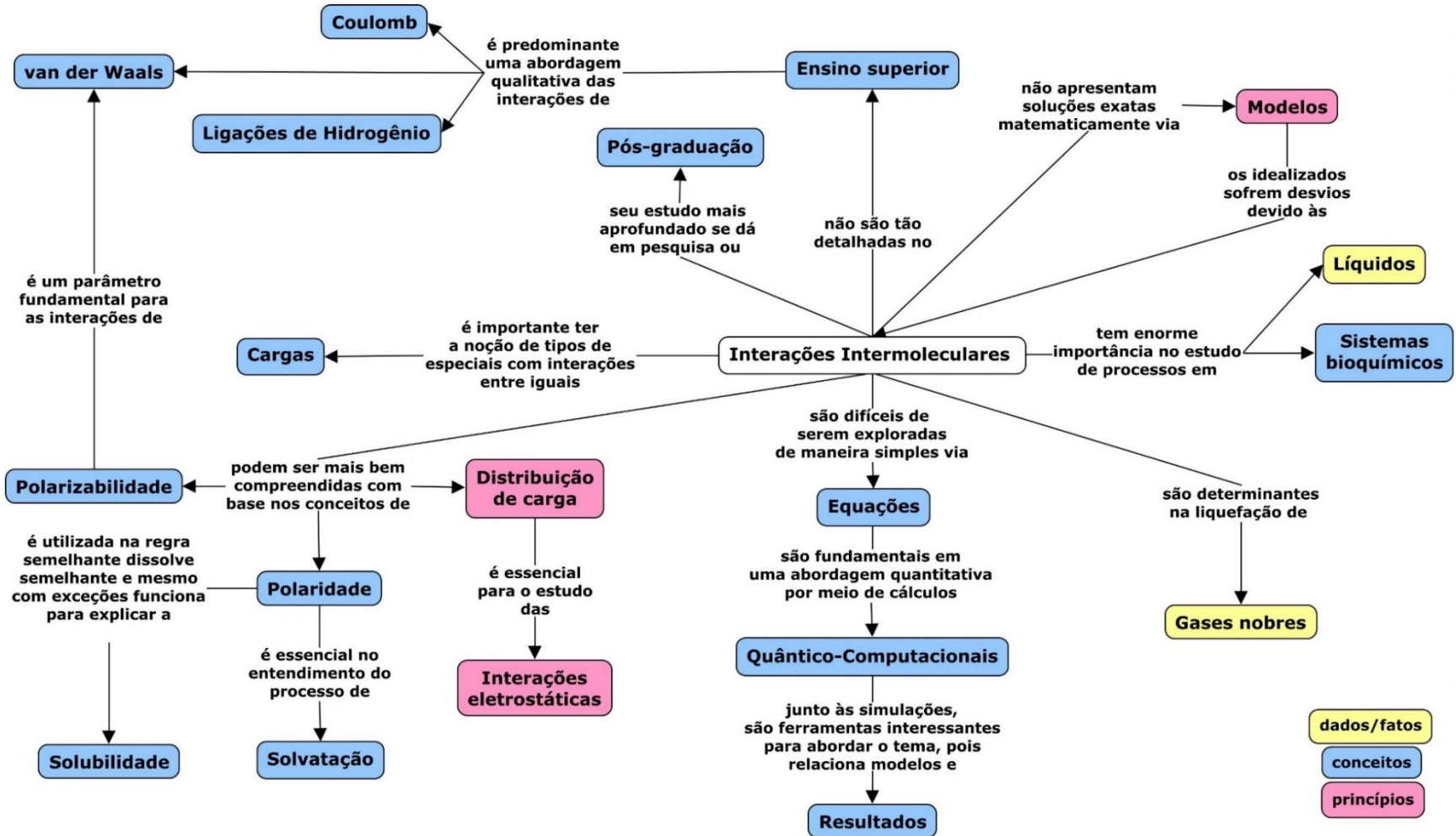


Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P10



Fonte: autoria própria.

Mapa Conceitual dos conteúdos extraídos da entrevista com o especialista P11



Fonte: autoria própria.