

Mapas Conceituais das Concepções de Pesquisadores sobre Interações Intermoleculares no Ensino Superior em Química

Conceptual Maps of Researchers' Conceptions on Intermolecular Interactions in Higher Education in Chemistry

Fábio Luiz Seribeli

Instituto de Química da Universidade de São Paulo - (IQ-USP)
fabioseribeli@usp.br

Flavio Antonio Maximiano

Instituto de Química da Universidade de São Paulo - (IQ-USP)
famaxim@iq.usp.br

Resumo

As interações intermoleculares são fundamentais no ensino superior em química, visto que o tema está disseminado pelo currículo do curso de química nas diferentes áreas e disciplinas, são essenciais na explicação e/ou interpretação de fenômenos e propriedades físico-químicas. O principal objetivo do presente estudo foi gerar mapas conceituais a partir das concepções de pesquisadores sobre as interações intermoleculares na graduação em química, a estrutura de conceitos, ideias e as relações que devem ser compreendidas pelos estudantes egressos. O procedimento metodológico teve como instrumento de coleta de dados entrevistas semiestruturadas e os resultados mostraram que o tema é muito disperso, considerando as opiniões de cada pesquisador. Os mapas conceituais extraídos das falas dos pesquisadores apontaram a importância de compreender a natureza eletrostática das interações, melhorar o entendimento da energia das interações e suas distintas contribuições, diferenciar o conceito de molécula e substância, além de outros conceitos e ideias fundamentais ao tema.

Palavras chave: interações intermoleculares, ensino de química, mapas conceituais, ensino superior.

Abstract

Intermolecular interactions are fundamental in higher education in chemistry, since the theme is disseminated throughout the chemistry course curriculum in different areas and disciplines, they are essential in explaining and/or interpreting physical-chemical phenomena and properties. The main objective of the present study was to generate conceptual maps from the researchers' conceptions about intermolecular interactions in undergraduate chemistry, the structure of concepts, ideas and the relationships that must be understood by the graduating students. The methodological procedure used semi-structured interviews as an instrument of data collection and the results showed that the theme is very dispersed considering the opinions of each researcher. The concept maps extracted from the speeches of the researchers

pointed out the importance of understanding the electrostatic nature of the interactions, improving the understanding of the energy of the interactions and their different contributions, differentiating the concept of molecule and substance, in addition to other concepts and ideas fundamental to the theme.

Key words: intermolecular interactions, chemistry teaching, concept maps, higher education.

Introdução

Uma das principais finalidades do ensino de química é que os estudantes compreendam a relação entre estrutura molecular ou composição da matéria e suas propriedades. Essa relação entre as estruturas moleculares e as propriedades é um conhecimento que pode ser aplicado na elaboração de novos materiais e em processos. Portanto, um conceito universal tão importante quanto às interações intermoleculares deve aparecer com maior ênfase no currículo de um curso de química (MURTHY, 2006).

Além da importância do tema, pode-se observar na literatura científica uma gama de investigações sobre as concepções e dificuldades dos estudantes de diferentes níveis de ensino sobre as interações intermoleculares e conceitos relacionados, parece relevante estudar também as concepções de pesquisadores sobre a estrutura conceitual do tema no ensino superior em química, que pode ser representada por mapas conceituais.

Os mapas conceituais podem ser compreendidos como formas de representação e organização do conhecimento através dos principais conceitos envolvidos em determinado tema e suas relações. Porém, a construção de mapas conceituais demanda de diversos aspectos relacionados a dedicação e tempo, sendo ainda mais complexa tal construção, quando o conhecimento representado é a partir de um texto escrito por outras pessoas (NOVAK, CAÑAS, 2010).

O estudo de García-Salgado *et al.* (2014) elabora mapas conceituais a partir de entrevistas com professores universitários sobre sua formação profissional, desempenho docente e concepções sobre a arte. Cada uma das entrevistas foi gravada e transcrita, após várias leituras analíticas foram realizadas categorizações com base nas principais ideias-chave e após essa fragmentação dos dados da entrevista, uma lista de conceitos e proposições foram utilizadas para a elaboração de mapas conceituais demonstrando que os mesmos podem ser ferramentas metodológicas para a representação e organização do conhecimento.

Nesse sentido, o presente trabalho tem como objetivo geral compreender a percepção sobre a estrutura de conceitos acerca das interações intermoleculares, baseada em entrevistas com pesquisadores que atuam no Ensino Superior em Química. Tal estrutura é gerada a partir dos principais conceitos e suas relações, que são consideradas fundamentais ao tema e emergem das entrevistas com pesquisadores e são transformadas em mapas conceituais como forma de organizar o conhecimento essencial para a compreensão das interações intermoleculares na graduação.

Percurso metodológico

A metodologia de pesquisa consiste a análise de conteúdo de entrevistas com onze pesquisadores em busca das ideias centrais sobre as interações intermoleculares, tema que está disseminado por todo o conhecimento químico. 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 tem o intuito de investigar textos (entrevistas transcritas) de forma sistemática, com foco nos conteúdos conceituais (POZO; CRESPO, 2009), desenvolvido a partir das entrevistas.

Participaram dessa pesquisa, onze professores de Ensino Superior em Química e que também desenvolvem pesquisas (teóricas ou experimentais), que apresentam fortes conexões com o tema interações intermoleculares nas seguintes instituições: IQ-USP, IQ-UNICAMP, UFSCar, UFRGS, UFOB e FFCLRP-USP. O grupo é formado por dez homens e uma mulher e 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.

Assim, a partir das transcrições das entrevistas foram elaboradas fichas de análise em que cada assunto 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 base no que emergiu das respostas dos pesquisadores. Uma codificação numérica foi criada para identificação do trecho selecionado no texto de transcrição da entrevista e essa foi a base das proposições utilizadas para gerar os mapas conceituais.

Depois de tudo codificado e as concepções dos pesquisadores organizadas na forma de mapas conceituais, um último mapa conceitual foi elaborado para sintetizar as principais ideias de todos os entrevistados e responder a seguinte questão de pesquisa: *Qual a estrutura conceitual do tema interações intermoleculares no contexto da graduação em química a partir de entrevistas com pesquisadores?*

Resultados e Discussões

Para melhor apresentação dos resultados, optou-se por apresentar a análise das entrevistas, mas os mapas conceituais de apenas dois dos sujeitos da pesquisa, além do mapa que resume as concepções de todos os pesquisadores para não exceder à extensão do trabalho. Os mapas conceituais das entrevistas de P4 e P10, foram escolhidos por retratarem bem a diversidade de conceitos abordados no contexto do tema interações intermoleculares.

Na química de maneira geral, P4 considera o tema fundamental principalmente pelo fato de as moléculas não estarem isoladas nas substâncias, conseqüentemente a reatividade e estrutura dos compostos são baseadas nas interações intermoleculares.

P7 considera que todas as propriedades de uma substância são baseadas nas interações intermoleculares. Já P1 pontua que o tema está espalhado pela química de forma meio que horizontal e que as interações intermoleculares são importantes para química de forma geral.

De acordo com Jasien (2008), as interações intermoleculares podem ser consideradas como

um dos muitos conceitos fundamentais ensinados na introdução de cursos de graduação em química. Tais interações são importantes para a compreensão de propriedades como pontos de ebulição e fusão de substâncias, bem como a solubilidade relativa dos compostos em solventes distintos.

Ao tratar das interações intermoleculares, o especialista P4 relata um exercício didático muito comum em suas aulas para abordar os principais conceitos acerca do tema. A partir de um dímero que pode ser água-metanol, água-amônia, água-água, água-cloreto ou até mesmo duas moléculas de metano, o estudante constrói a previsão da geometria de equilíbrio.

No contexto desse exercício, um dos requisitos é desenhar o gráfico de energia de interação, energia em função da distância para o tal dímero, identificar a geometria de equilíbrio com a mínima energia e também o momento em que a energia tende a zero. Nos detalhes desse exercício percebe-se que todas as interações intermoleculares podem ser abordadas destacando suas diferenças de magnitude e cargas envolvidas no sistema.

Para o especialista P3, os diferentes potenciais de atração e repulsão, caracterizando a intensidade dependendo da distância intermolecular de uma dada espécie química é muito bem abordada através do potencial de Lennard-Jones, segundo P3, é um grande modelo para explicar realmente o porquê de tal formato desses gráficos.

Segundo P6, a principal diferença de uma ligação de hidrogênio pra uma ligação sigma ou pra uma 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, é a energia.

...A diferença de uma pra outra é a energia, basicamente é a energia, porque essas três ligações, elas são detectadas no espectro...(P6)

De acordo com Rivera-Rivera *et al* (2017), não há distinções fundamentais entre ligações químicas e as interações intermoleculares e entre as próprias interações, a principal diferença está restrita a energia envolvida em tais ligações/interações.

Outro conceito que emerge das entrevistas, ligação de hidrogênio, que segundo P4, deve ser vista como uma somatória de diferentes tipos de interação, tendo a componente eletrostática como principal, mas também contribuições de transferência de carga, indução, etc. Mesmo que via simulação seja possível uma boa descrição da ligação de hidrogênio, considerando apenas o termo eletrostático da equação, é essencial a percepção de que se trata de uma resultante de várias interações.

P2 ressalta que há muitas pesquisas sobre as ligações de hidrogênio e é importante reconhecer que tal tipo de interação pode ser considerada puramente eletrostática sem nenhuma coisa sobrenatural. Na opinião de P1, é fundamental que os estudantes também tenham a noção dos ângulos e distâncias de ligação, além das magnitudes características das ligações de hidrogênio.

É essencial que os inúmeros detalhes, que não são poucos, sobre as ligações de hidrogênio, sejam abordados na graduação, 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).

O especialista P4 acentua algo importante, que uma visão molecular é fundamental para um químico moderno, mas não sabe mensurar o quanto seria importante ao químico que vai para a indústria. P8 também considera que falta aos estudantes, uma visão atômico-molecular dos fenômenos e assinala que muitas vezes já percebeu dificuldades de seus alunos de graduação até quanto ao entendimento da própria dimensão dos átomos e moléculas.

De acordo com Torres *et al* (2010), os alunos confundem o fato de o ponto de ebulição ser uma propriedade macroscópica de uma substância e não uma propriedade atômica, para os autores, é essencial superar as distâncias conceituais existentes entre estruturas atômicas e moleculares (submicroscópico) e as propriedades físicas das substâncias (macroscópico).

A Figura 1 apresenta o mapa conceitual elaborado a partir da análise da entrevista do especialista P4, os conceitos que emergiram e frases de ligações conforme a metodologia. Lembrando que os mapas conceituais foram gerados para todas as entrevistas.

De acordo com P10, mesmo que se tenham as propriedades de uma molécula isolada, às vezes até de moléculas complexas, experimentalmente não se trabalha com uma única molécula. Os químicos trabalham com 10^{15} , 10^{20} moléculas, logo, há um problema conceitual ao tentar entender as propriedades macroscópicas a partir das propriedades de uma molécula.

Ainda há muitos equívocos por parte dos estudantes em relação à atenção dirigida a características composicionais em vez de estruturais e isso também está vinculado ao fato de que o conhecimento do aluno sobre as características de uma molécula não implica na compreensão das propriedades de uma substância (TALANQUER, 2018).

O pesquisador P10 tenta mostrar ao longo da entrevista, que muitas propriedades são deduzidas sem considerar as interações intermoleculares e isso pode ser a origem de problemas conceituais relacionados ao tema.

...a principal fonte do erro conceitual de fazer considerações baseado na molécula isolada e de querer dizer que um líquido é uma porção de moléculas isoladas que ficaram juntas, mas aí aparecem interações que você nunca ia levar em conta, se você tivesse pensando em uma molécula isolada... (P10)

Nesse sentido, P10 ressalta que quando os químicos trabalham com fases condensadas e devem perceber que as propriedades de uma substância não são explicadas pelas forças das ligações químicas, mas pelas forças que unem as moléculas que constituem tal substância.

Nesse sentido, P5 lembra que as próprias forças dispersivas, que muitas vezes são classificadas como fracas, mas coletivamente podem proporcionar aplicações diretamente associadas a magnitude de tais forças.

...ele tem que entender o contexto todo. Porque, lógico, uma única interação dispersiva é muito fraca, mas se você tiver 10^6 , certo?... (P5)

Outro aspecto levantado, uma falha conceitual importante no contexto do tema e relacionada à estrutura molecular, P10 afirma que os químicos são levados a priorizar conceitos estáticos em prejuízo de conceitos dinâmicos, como se a estrutura molecular estivesse congelada no tempo, principalmente as interações intermoleculares que estão formando e desformando numa grande velocidade.

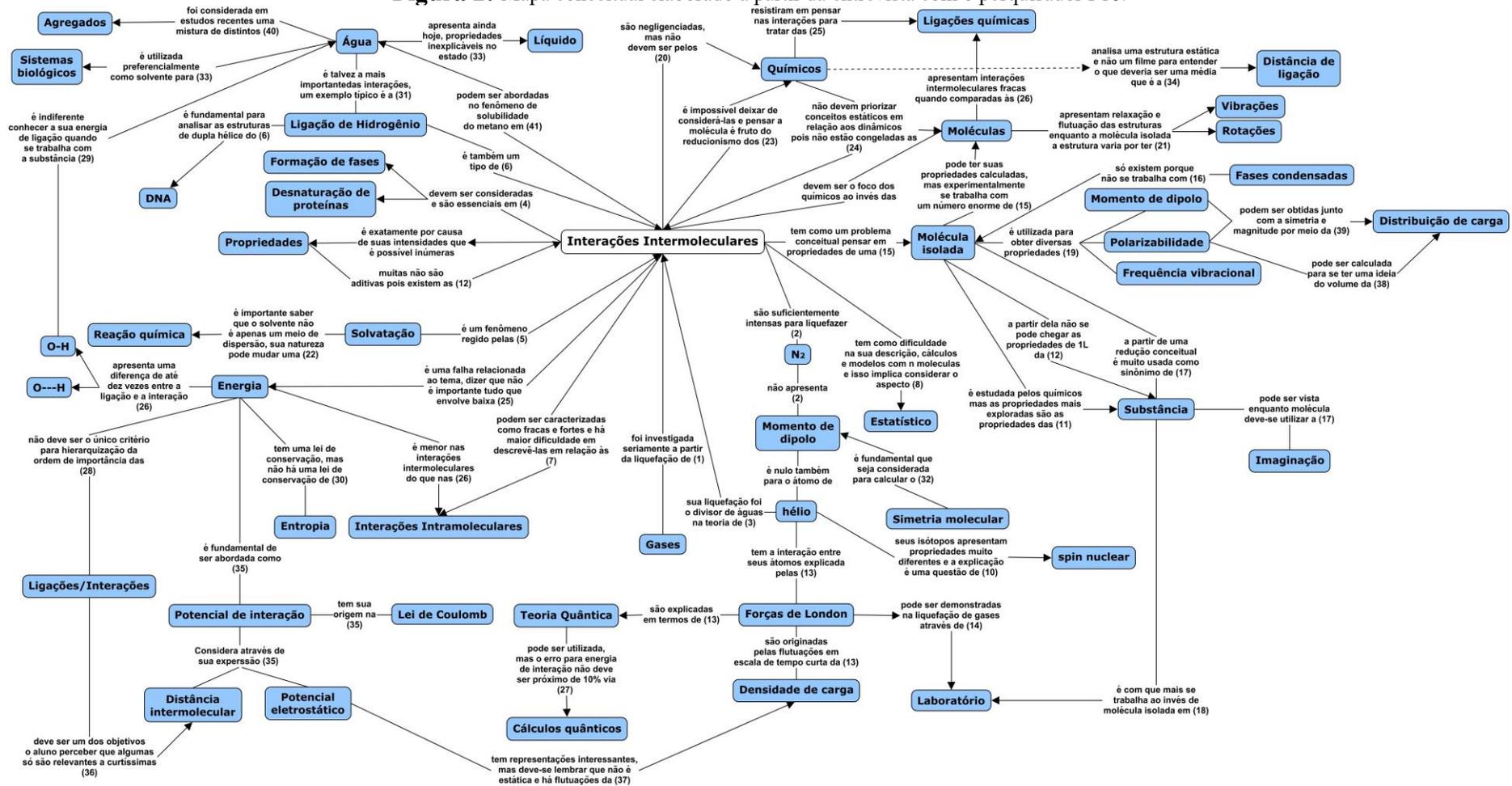
Por conseguinte, quando se desenha a estrutura de um dímero ou trímero da água ou outra substância que tenha ligações de hidrogênio, aquilo é uma fotografia instantânea, mas numa escala de picossegundos, pode-se perceber que tais ligações estão formando e desformando rapidamente.

Para P9, existem ideias já estabelecidas no conhecimento dos estudantes e que dificultam à introdução e consequente aprendizado dos aspectos estatísticos fundamentais ao tema.

...Exatamente, ele tá tão arraigado, “semelhante dissolve semelhante” e “entropia com desordem” que cê não consegue introduzir a parte estatística... (P9)

O especialista P11 considera que a computação pode ser um recurso de abordagem do tema para aplicar os aspectos estatísticos e verificar a relação entre modelo e resultado. A Figura 2 apresenta outro mapa conceitual gerado a partir da análise das entrevistas, agora com o pesquisador P10.

Figura 2: Mapa conceitual elaborado a partir da entrevista com o pesquisador P10.



Fonte: Próprios autores.

Após as entrevistas com os onze pesquisadores, uma síntese geral foi realizada com os conceitos fundamentais, principais ideias e destaque ao que os especialistas consideram sobre o tema, reunindo percepções em comum dos pesquisadores, além de um mapa que resume a rede de conceitos de todas essas entrevistas.

Em resumo, especialistas que atuam na área de simulação computacional enfatizam a importância de considerar a magnitude de cada tipo de interação e o reconhecimento da atuação de diferentes tipos de interações em um mesmo sistema. Os especialistas experimentais destacaram principalmente, que fenômenos envolvendo líquidos são fundamentais na abordagem do tema, em especial envolvendo a substância água, logo, a noção de aspectos entrópicos, estatísticos e moleculares são essenciais. Em comum, os especialistas consideram que os parâmetros moleculares que tratam da distribuição de cargas nas estruturas das moléculas.

A Figura 3 representa um mapa conceitual na tentativa de resumir o que emergiu das onze entrevistas e sugerir a estrutura conceitual sobre as interações intermoleculares no contexto do Ensino Superior em Química.

Considerações finais

Os diferentes aspectos apresentados aqui, respondem à questão de pesquisa e constituem a possível estrutura conceitual do tema interações intermoleculares no contexto da graduação em química a partir de entrevistas com pesquisadores. 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.

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, das ligações químicas e pode ser calculada de maneira clássica, por meio de equações que são representadas por uma somatória dos termos de cada contribuição, além de constituída por parâmetros moleculares correlacionados a uma distância intermolecular específica.

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 e demandam dos 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 deste parâmetro molecular.

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. 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.

A interpretação de fenômenos e explicação de propriedades a partir do ponto de vista atômico-molecular, essa perspectiva deve estar presente no contexto de ensino e aprendizagem da química, sobretudo das interações intermoleculares. Outro conceito 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 fim, o ensino das interações pode ser pautado por teoria, experimentação e simulação, principalmente por possibilitar a ideia 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.

Agradecimentos e apoios

A CAPES pelo apoio financeiro.

Referências

GARCÍA-SALGADO, Diana. E.; AGUILAR-TAMAYO, Manuel. F.; ESPINOSA-MONTERO, Juan.; MANZANO-CAUDILLO, Jesús. Modelos de Conocimiento: Uma Metodología de Investigación em el Posgrado. **Conference on Concept Mapping - CMC**, Santos, Brazil, v. 2, p. 355-362, 2014.

JASIEN, Paul G. Helping Students Assess the Relative Importance of Different Intermolecular Interactions. **Journal of Chemical Education**. v. 85, n.9, p. 1222-1225, 2008.

MURTHY, Parvathi S. Molecular Handshake: Recognition through Weak Noncovalent Interactions. **Journal of Chemical Education**, v. 83, n. 7, p. 1010-1013, 2006.

NOVAK, Joseph D.; CAÑAS, Alberto J. A teoria subjacente aos mapas conceituais e como elaborá-los e usá-los. **Práxis Educativa**, v. 5, p. 9-29, 2010.

POZO, Juan I.; CRESPO, Miguel A. G. **A aprendizagem e o ensino de ciências: do conhecimento cotidiano ao conhecimento científico**. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2009.

RIVERA-RIVERA, Luis A., WALTON, Jay R., LUCCHESI, Robert R., BEVAN, John 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.

TALANQUER, Vicente. Progressions in reasoning about structure–property relationships. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 19, p. 998-1009, 2018.

TORRES, Noemí., LANDAU, Leonor, BAUMGARTNER, Erwin, MONTESERIN, Haydee. Fuerzas intermoleculares y su relación con propiedades físicas: búsqueda de obstáculos que dificultan su aprendizaje significativo. **Educación Química**, v. 21, n.3, p.212-218, 2010.

WEINHOLD, Frank, KLEIN, Roger A. What is a hydrogen bond? Resonance covalency in the supramolecular domain. **Chemistry Education Research and Practice**. v. 15, p. 276–285, 2014.