

# **Interações Intermoleculares: concepções de especialistas sobre o tema na graduação em química**

## **Intermolecular interactions: conceptions of specialists on the subject in graduation 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 tem papel fundamental no conhecimento químico uma vez que a natureza e a força dessas interações determinam as propriedades das substâncias. O objetivo principal do presente trabalho foi verificar a partir das concepções de especialistas, o que um químico deve saber sobre as interações intermoleculares, quais os conceitos fundamentais e ideias-chave sobre o tema. A abordagem metodológica aplicada foi qualitativa, tendo como instrumento de coleta de dados entrevistas semiestruturadas, cujo resultado demonstrou que o tema deve ser visto com mais centralidade na graduação em química. Os especialistas apontaram a necessidade de melhorar a abordagem do tema interações intermoleculares, para um ensino com ênfase tanto em aspectos da natureza das interações e quanto numa melhor compreensão dos aspectos energéticos envolvidos. Também foram apontados os principais conceitos fundamentais que, na opinião dos especialistas, devem ser melhor compreendidos pelos alunos.

**Palavras chave:** interações intermoleculares, ensino de química, ensino superior, aprendizado conceitual.

### **Abstract**

Intermolecular interactions play a fundamental role in chemical knowledge since the nature and strength of these interactions determine the properties of the substances. The main objective of the present work was to verify from the conceptions of specialists, what a chemist should know about the intermolecular interactions, which are the fundamental concepts and key ideas on the subject. The methodological approach applied was qualitative, having as an instrument of data collection semi-structured interviews, whose result showed that the theme should be seen more centrally in the undergraduate degree in chemistry. The experts pointed out the need to improve the approach of the topic intermolecular interactions, for a teaching with emphasis on both the nature of the interactions and a better understanding of the energy

aspects involved. The main fundamental concepts that, in the opinion of the experts, should be better understood by the students were also pointed out.

**Key words:** intermolecular interactions, chemistry teaching, higher education, conceptual learning.

## Introdução

Algo tão óbvio quanto à evidência de que a maioria dos materiais existe como líquidos e sólidos é um testemunho da 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).

Um dos principais objetivos do ensino de química é ensinar aos alunos a compreensão da relação entre composição, estrutura molecular e propriedades da matéria e suas propriedades. As forças intermoleculares são um dos muitos conceitos fundamentais ensinados nos cursos introdutórios de química, sendo largamente utilizadas na explicação das propriedades físico-químicas das substâncias, como pontos de fusão e ebulição, tensão superficial, viscosidade e propriedades coligativas. Logo, em várias disciplinas do curso de química, essas interações também são usadas para fundamentar certos fenômenos específicos dentro do conhecimento químico (capilaridade, adsorção, solubilização, efeito hidrofóbico). (JASIEN, 2008).

Diante do exposto o presente trabalho é orientado pela seguinte questão de pesquisa: *O que um graduando em química deve saber sobre o tema interações intermoleculares na concepção de especialistas sobre o tema?*

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 como 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.
- Compreender e interpretar as equações das energias potenciais

Buscando contemplar a hipótese do trabalho, a investigação proposta apoiou-se na importância de se analisar o que especialistas, que tenham suas pesquisas relacionadas ao tema, apresentam sobre o que um químico deve saber sobre as interações intermoleculares. 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.

O presente estudo tem como objetivo geral definir qual a estrutura mínima de conhecimento do tema: interações intermoleculares, que um egresso do curso de graduação em Química deve conhecer. Entende-se como estrutura de conhecimento o elenco dos principais conceitos que compõe o tema na concepção de especialistas, suas definições e inter-relações entre os mesmos, fundamentais para uma correta e profunda compreensão do assunto em questão. Aqui nosso foco está primeiramente na determinação do elenco dos principais conceitos envolvidos.

## **Percurso metodológico**

O estudo apresenta as características de uma pesquisa qualitativa, pois tem 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, especialistas (teóricos/experimentais) do Instituto de Química da Universidade de São Paulo, cujas linhas de pesquisa se relacionam diretamente com o tema, os especialistas serão caracterizados para citação e análise, preservando a identidade dos mesmos, nomeando-os de forma aleatória de P1 a P5. É importante ressaltar que a investigação pretende estender o número de sujeitos de pesquisa, mas inicialmente os dados coletados a partir de cinco especialistas, são tidos como suficientes em análise primária.

Foram realizadas entrevistas semiestruturadas com os especialistas como instrumento de pesquisa e um roteiro com os principais tópicos a serem investigados foi utilizado, constantemente pensando na questão de pesquisa que norteia o trabalho. Em seguida, efetuou-se a transcrição das entrevistas para facilitar o procedimento de categorização e análise de conteúdo com o auxílio do software Nvivo 8 (2008). A codificação dos textos foi feita, em uma primeira abordagem, baseada nas categorias do próprio roteiro das entrevistas. Aqui, são abordadas as categorias referentes a: i) Como o especialista vê o ensino do tema em um curso de graduação; ii) Os conceitos fundamentais, e: iii) ideias-chave que um químico deve saber sobre o tema.

Depois de tudo codificado, organizado em categorias, foi realizada a recuperação via software, das citações e falas dos entrevistados para inferência, interpretação e efetiva análise de conteúdo qualitativa, finalizando com uma redação final de síntese entre os diversos elementos encontrados relacionados à questão de pesquisa: *O que um químico deve saber sobre o tema interações intermoleculares?*.

## **Resultados e Discussões**

Os cinco entrevistados para o presente trabalho são professores do curso de graduação em química do Instituto de Química da Universidade de São Paulo, todos são formados em química, sendo três deles, pelo próprio IQ-USP. O grupo é formado por quatro homens e uma



O Quadro 1 sintetiza os conceitos em destaque da entrevista de cada especialista, o fenômeno apontado como interessante para abordagem do tema interações intermoleculares e os conceitos fundamentais em comum citados pelos professores.

Sujeitos da Pesquisa	Conceitos em destaque	Fenômenos	Conceitos fundamentais em comum citados pelos entrevistados
P1	Estrutura molecular	Efeito hidrofóbico	Interações eletrostáticas, polaridade, polarizabilidade, forças dispersivas, energia de interação, densidade eletrônica, momento de dipolo, forças de van der Waals, estrutura molecular, ligação de Hidrogênio, solubilidade.
P2	Interações eletrostáticas	Capilaridade	
P3	Densidade eletrônica	Volatilidade	
P4	Potencial de Lennard-Jones	Solubilidade	
P5	Forças dispersivas	Tensão superficial	

Quadro 1: Síntese dos conceitos fundamentais acerca do tema a partir das entrevistas

Analisando os conceitos em destaque (interações eletrostáticas, densidade eletrônica, polaridade e polarizabilidade) percebe-se que os mesmos sugerem a ideia de uma propriedade molecular representada pela distribuição de cargas nas moléculas. A partir disso, é possível observar que o tema interações intermoleculares deve ser abordado com ênfase em parâmetros moleculares.

Em seguida, outros conceitos que emergem das entrevistas dos especialistas com frequência menor, mas ainda com destaque considerável (geometria molecular, momento de dipolo, estrutura molecular, energia de interação e solubilidade). Esses conceitos convergem com a ideia de logo depois das propriedades moleculares se faz importante o entendimento da estrutura das moléculas, polaridade das mesmas, os tipos de interação e propriedades físico-químicas que auxiliam na compreensão do tema.

Os conceitos fundamentais em destaque, apontados pelos especialistas, corroboram com os dois primeiros itens apresentados por Junqueira (2017) como ideias essenciais que precisam ser apreciadas 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.

Os especialistas afirmam, sobretudo, ser importante interpretar as consequências ou relação desses conceitos com propriedades físico-químicas: pontos de fusão e ebulição, tensão superficial, solubilidade, volatilidade, viscosidade, diagrama de fases, espectroscopia, propriedades coligativas, efeito hidrofóbico, polímeros e exemplos na natureza.

Sobre este aspecto, fundamentado em um estudo sobre as interações não covalentes, Murthy (2006) considera que uma das principais finalidades da educação química é ensinar os alunos a entender a relação entre estrutura molecular ou composição da matéria e suas propriedades.

Sobre a categoria (iii) que apresenta as ideias-chave que um químico deva saber sobre o tema. Um dos professores enfatizou o cuidado em não estabelecer conexões reducionistas como “semelhante dissolve semelhante”

*...tem que ter a noção de que não é semelhante que dissolve semelhante, ele tem que ser capaz de fazer uma análise um pouco mais crítica disso... (P1)*

Correlações simplistas entre parâmetros e propriedades físico-químicas, como por exemplo, relacionar de forma linear o tipo de interação com o ponto de ebulição, algo já referido na literatura como equívocos que emergem das concepções prévias no processo de ensino e aprendizagem do tema (PECKHAM; MCNAUGHT, 2012).

Outro fator que deve ser considerado, segundo os especialistas, a ligação de hidrogênio mesmo tendo considerável magnitude em relação às outras interações, isso não corresponde exatamente a maior parcela de contribuição na energia de interação total (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2010).

Praticamente todos os entrevistados apontaram a pertinência da compreensão da existência das forças dispersivas de London, desde a natureza das mesmas até atuação em qualquer sistema de interação entre moléculas. Destacam em suas falas que as forças de London têm papel fundamental em vários tipos de fenômenos físico-químicos dentro do conhecimento químico e a importância de sua contribuição na energia de interação, o que às vezes é colocado equivocadamente nos livros de graduação, em termos de magnitude dessas forças. O docente P3 destaca a universalidade das forças dispersivas.

*...DFT, por exemplo, que acaba pecando em um monte de coisas, você tem que colocar essas correções do efeito dispersão. O efeito dispersão é um exemplo que eu falo com os meus alunos sempre, eu falo "gravidade", você está sempre sentindo a gravidade. Então, o efeito de dispersão está lá, sempre... (P3)*

A energia de interação pode ser mais bem compreendida com a equação da energia potencial total das interações intermoleculares. O primeiro termo corresponde às interações do tipo dipolo-dipolo, o segundo as forças de dispersão e o terceiro as forças de atração de indução (GLAZIER; MARANO; EISEN, 2010).

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

Um dos professores defende a ideia de que uma boa base de mecânica quântica seria ideal para entender precisamente as forças intermoleculares usando como ferramental a teoria da perturbação, mas salienta que se o formando em química souber utilizar e interpretar as equações de energia potencial é o suficiente para a compreensão do tema, uma vez que tal equação ressalta a natureza aditiva dos diferentes tipos de interação que podem operar quando se aproximam duas moléculas (JASIEN, 2008). Dois docentes acreditam que o uso de ferramentas computacionais de simulação poderia auxiliar na melhor assimilação desses conhecimentos.

Três dos sujeitos da pesquisa acreditam que seria essencial que um químico consiga visualizar as interações intermoleculares de maneira unificada e sempre considerando as diferentes contribuições, em termos de magnitude de cada tipo de interação, mencionam que a ferramenta mais prática para esse tipo de interpretação seria a utilização de uma expansão de equação como apresentada acima em que os distintos termos representem cada parcela de cooperação na energia de interação total. P2 sublinha a questão da unificação das interações

*...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, é tentar mostrar para o aluno que isso são termos de uma coisa só, unificar. (P2)*

Mais que o aspecto quantitativo presente nessa abordagem, espera-se que o químico tenha uma compreensão conceitual e qualitativa dos parâmetros moleculares implícitos em cada termo ou gráfico da equação de energia potencial.

## Considerações finais

Este trabalho objetivou investigar as concepções de especialistas sobre o que um químico deve saber sobre as interações intermoleculares, quais os conceitos fundamentais e ideias-chave desse tema, bem como identificar contribuições que ajudem a definir uma estrutura conceitual.

De maneira geral, esta investigação demonstrou que os docentes entrevistados consideram relevante a compreensão da estrutura molecular para entender sua relação com uma gama de propriedades físico-químicas. Densidade eletrônica, polarizabilidade, polaridade e interações eletrostáticas foram os conceitos mais citados pelos especialistas, sendo que esses parâmetros estão relacionados com a distribuição de cargas em uma estrutura molecular.

Algumas das concepções apresentadas pelos entrevistados referentes à universalidade das forças de London, aditividade das interações, magnitude das energias de interação e correlação de parâmetros moleculares com propriedades dos materiais, estão em concordância com alguns estudos da área de educação química (GOTTSCHALK E VENKATARAMAN, 2014; GLAZIER; MARANO, 2010; MURTHY, 2006).

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 graduandos em química. 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 separação 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 que proporcione aos graduandos uma visão mais molecular das interações.

## Agradecimentos e apoios

A CAPES pelo apoio financeiro.

## Referências

- BARDIN L. **Análise de conteúdo**. Lisboa: Edições 70; 1977.
- 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.
- 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.
- 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**, 87,12, 1336-1341, 2010.

GOTTSCHALK, E.; VENKATARAMAN, B. Visualizing Dispersion Interactions. **Journal of Chemical Education**. v. 91, n. 5, p. 666–672, 2014.

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

JUNQUEIRA, M. M., 2017. 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.

KOTZ, J. C.; TREICHEL, P. M.; WEAVER, G. C. **Química Geral e Reações Químicas**, 1-2. 6ª ed. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

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

NVIVO 8 for Windows. (2008). [S.l.: s.n.], [2008]. Recuperado em 11 outubro, 2018, de <http://w3.unisa.edu.au/ists/new/staff/software/NVivo8-Getting-Started-Guide.pdf>

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.

PECKHAM, G. D.; McNAUGHT, I. J. Teaching Intermolecular Forces to First-Year Undergraduate Students. **Journal of Chemical Education**, v. 89 , p. 955-957, 2012.