

Interações Intermoleculares: concepções de pesquisadores sobre o tema no ensino superior em química.

Fábio Luiz Seribeli¹ (PG)*, Flavio Antonio Maximiano¹ (PQ).

*fabioseribeli@usp.br

¹Programa de Pós-Graduação em Química - Instituto de Química, Universidade de São Paulo (IQ-USP), Av. Prof. Lineu Prestes, 748 - Vila Universitária, CEP: 05508-000 - São Paulo – SP.

Palavras-Chave: Ensino de Química, Graduação.

RESUMO

As interações intermoleculares são fundamentais no contexto do conhecimento químico, uma vez que a natureza e a magnitude de tais interações definem as propriedades físico-químicas das substâncias. O presente trabalho teve como objetivo investigar com base nas concepções de pesquisadores, o que um químico deve saber sobre as interações intermoleculares, quais os conceitos fundamentais e principais ideias sobre o tema. Foi aplicada uma metodologia de caráter qualitativo, contando como ferramenta de coleta de dados entrevistas semiestruturadas, cujos resultados evidenciaram que o tema deve ser visto com maior centralidade durante a graduação em química. 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 dos conceitos 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.

INTRODUÇÃO

As interações entre as moléculas são de extrema importância dentro do conhecimento químico, principalmente por conectar os universos atômico-molecular e macroscópico. Tais interações, geralmente são entendidas no âmbito das forças atrativas e repulsivas entre moléculas (HERBST; MONTEIRO FILHO, 2019), constituindo-se num modelo explicativo fundamental na explicação de diferentes fenômenos físico-químicos como, por exemplo, os efeitos da adsorção (cromatografia) e viscosidade, os distintos estados físicos da matéria, as tendências em solubilidade, as diferenças entre pontos de fusão e ebulição, as interações entre fármacos e receptores. (DA SILVA JÚNIOR et al. 2015).

Outro papel de considerável relevância do tema é a constatação de que os conceitos associados ao mesmo estão disseminados por todo curso de graduação em química. Formalmente as interações intermoleculares são abordadas em química geral, mas estão presentes, talvez até de forma implícita em outros tantos tópicos abordados no curso de graduação, como, métodos de separação na química analítica, estrutura de macromoléculas e catálise enzimática, propriedades físicas de substâncias, etc.

Os conteúdos de ensino que envolve conceitos científicos que podem ser considerados como sendo formados por fatos e/ou dados, conceitos específicos e princípios (POZO; CRESPO, 2009).

Os dados ou fatos estão presentes em pontos específicos do currículo e seu uso não necessita de compreensão, mas devem ser relacionados aos conceitos

específicos, os estudantes podem, por exemplo, citar a fórmula molecular ou ponto de ebulição da água sem conhecer os significados de tais fatos (POZO; CRESPO, 2009).

Já os conceitos específicos ao serem utilizados exigem compreensão e têm como uma das finalidades dar sentido aos dados. Além disso, pode-se considerar que os próprios conteúdos que constituem as ciências são estruturados por estes conceitos e suas inter-relações. O conceito de polaridade, por exemplo, demanda a compreensão da relação existente entre estrutura eletrônica, geometria molecular e disposição dos elétrons nas moléculas (POZO; CRESPO, 2009).

Por outro lado, os princípios ou conceitos estruturais são as leis e grandes generalizações do pensamento em uma determinada disciplina sendo, de certa forma, transversais e subjacentes ao longo de todo o conteúdo desta disciplina. Por exemplo, a conservação de energia é um conceito estrutural na abordagem de diversos conceitos em química e também em física (POZO; CRESPO, 2009).

Pode-se considerar que a compreensão, assimilação ou construção destes princípios deve ser a finalidade do currículo (POZO; CRESPO, 2009). Assim, a enumeração dos dados, conceitos e princípios, pode então ser considerada como uma tentativa de elucidação da organização conceitual de um determinado tópico ou tema que compõe uma disciplina.

O presente trabalho é guiado pela seguinte questão de pesquisa: Quais são considerados os conceitos fundamentais, ideias centrais e princípios sobre o tema interações intermoleculares no ensino superior em química, segundo pesquisadores especialistas no tema?

O objetivo geral do trabalho é, portanto, a definição da organização conceitual do tema interações intermoleculares, que o concluinte de um curso de graduação em Química deve compreender, na opinião destes especialistas. Tal organização conceitual será dada pelos principais conceitos, ideias e princípios que emergem das entrevistas com os pesquisadores, além de suas definições e conexões estabelecidas entre si. Pretende-se também verificar se as opiniões dos entrevistados coincidem ou corroboram com a hipótese aqui defendida de que o ensino do tema deve enfatizar a distribuição de cargas na estrutura das moléculas, as correlações entre energia de interação, distâncias intermoleculares e fenômenos físico-químicos, para uma melhor compreensão do tema.

PERCURSO METODOLÓGICO

O presente trabalho faz parte de um projeto maior, aqui consiste a análise de conteúdo de entrevistas com dez pesquisadores em busca das ideias centrais sobre as interações intermoleculares, tema que está disseminado por todo o conhecimento químico. Mais detalhes de como foram obtidos e analisados os dados para a proposta de uma estrutura conceitual do tema serão 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, 2009) tem o intuito de investigar textos (entrevistas transcritas) de forma sistemática, através de um sistema de categorias, desenvolvido a partir das entrevistas e orientado por um referencial teórico.

Para 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, dez 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 nove 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, sete 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 P10.

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, sempre observando a questão de pesquisa que conduz o trabalho. As questões presentes no roteiro foram organizadas em tópicos: A) o tema na pesquisa do entrevistado; B) A estrutura do tema; C) O tema nas disciplinas ministradas; D) 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. Aqui, foram tratadas as categorias concernentes a subtópicos de B (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.

Posteriormente às categorizações, os excertos das entrevistas foram utilizados para inferência, interpretação e efetiva análise de conteúdo qualitativa com base no referencial teórico acima citado. Assim, a partir das transcrições das entrevistas foram elaboradas fichas de análise, exploradas pelas categorias (i), (ii) e (iii), em que cada conceito 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, além de dados/fatos e princípios que emergem das respostas dos pesquisadores e uma codificação para identificação no texto da transcrição. Um recorte da ficha de análise da entrevista com P1 é apresentado no Quadro 1.

Quadro 1: Recorte da ficha de análise da entrevista com o especialista P1.

Dados/fatos	Excerto	Conceitos	Código
Célula	<i>“...o funcionamento da célula depende de interações intermoleculares...”</i>	Interações intermoleculares	(1)
Conceitos	Excerto	Conceitos	Código
Interações de van der Waals	<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)
Princípios	Excerto	Conceitos	Código
Visão molecular	<i>“...eu acho que o químico tem que ter uma interpretação mais molecular e, até atômica dos fenômenos...”</i>	químico molecular/atômica fenômenos	(4)

Para o item (i) foram extraídos trechos das respostas dos pesquisadores sobre qual a importância do tema interações intermoleculares no conhecimento químico. Para o item (ii) nuvens de palavras sintetizam os conceitos centrais e fenômenos sugeridos de cada entrevista, além dos mais frequentes no conjunto das análises. Um quadro foi elaborado para evidenciar conceitos fundamentais e principais fenômenos de cada entrevista. No item (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.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Sobre a categoria que engloba as opiniões dos professores 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 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 também influenciam significativamente em 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.

Com relação à categoria que apresenta os conceitos que, nas concepções dos pesquisadores, são fundamentais para um químico compreender o tema (item (ii)). A nuvem de palavras¹ (Figura 1) apresenta os conceitos fundamentais relacionados ao tema, extraídos das entrevistas com os pesquisadores. 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. 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 dentro do 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 1, “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 as mesmas são atribuídas às interações coulômbicas entre cargas separadas por uma distância.



Figura 1: Conceitos fundamentais mais presentes nas entrevistas com os pesquisadores.

O termo solubilidade aqui representa outros conceitos que tratam deste fenômeno como “soluções”, “solvatação”, “dissolver” e “solvente”. Tal propriedade é

¹ Todo procedimento foi realizado via Word Art que é um criador de arte de nuvem de palavras on-line.

muito utilizada para ilustrar de forma macroscópica, a dinâmica das interações intermoleculares, sobretudo quando é sabido 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 por apenas 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, o que nos faz pensar se 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. 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 ($1/r^n$).

A Figura 2 descreve através de uma nuvem de palavras, 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 anfífilas 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).

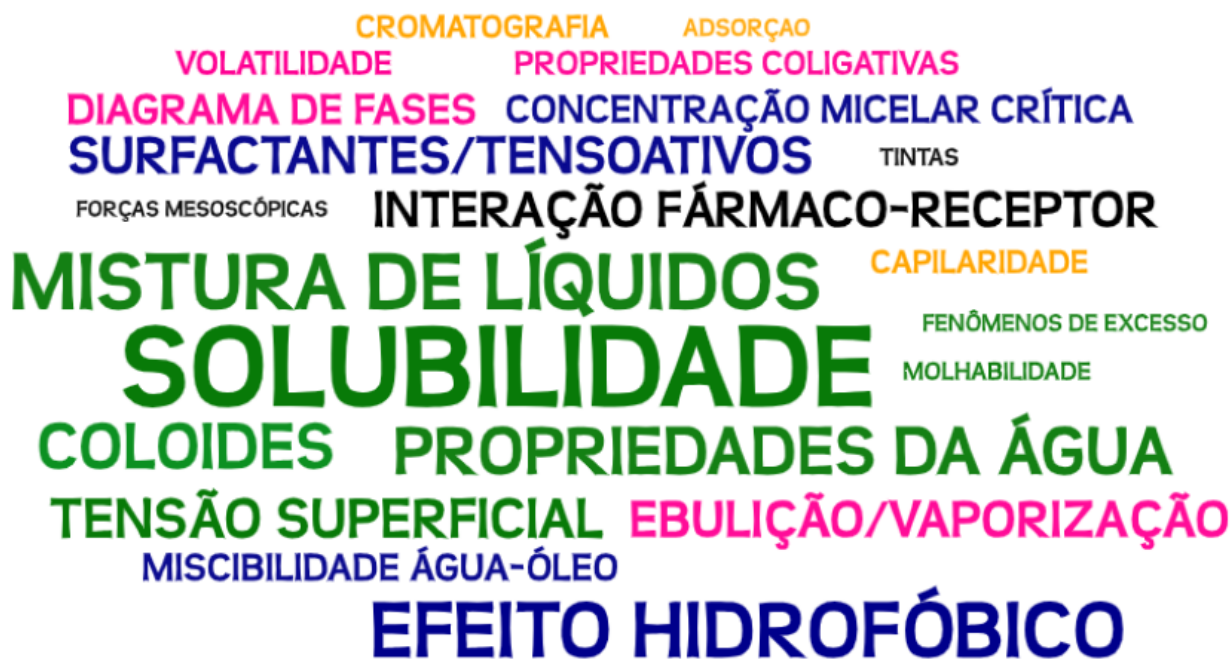


Figura 2: Fenômenos sugeridos e outros que emergiram das entrevistas com os pesquisadores.

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 induzido 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 2 esclarece melhor os dados das nuvens e traz os conceitos em destaque de cada entrevista, os conceitos em comum que emergiram durante as falas dos pesquisadores, além dos fenômenos sugeridos pelos mesmos e outros extraídos do todo da entrevista.

Quadro 2: Síntese dos conceitos fundamentais e fenômenos/processos 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 Ebulição/Vaporização Mistura de Líquidos Diagrama de Fases Propriedades da Água Propriedades Coligativas Cromatografia Tintas Forças Mesoscópicas Adsorção Molhabilidade Surfactantes/Tensoativos
P2	Interações Eletrostáticas	Polaridade	Capilaridade	
P3	Densidade Eletrônica	Polarizabilidade	Volatilidade	
P4	Potencial de Lennard-Jones	Forças Dispersivas	Solubilidade	
P5	Forças dispersivas	Energia de interação	Tensão Superficial	
P6	Potencial Eletrostático	Densidade Eletrônica	Interação Fármaco-receptor	
P7	Energia de Interação	Momento de Dipolo,	Fenômenos de Excesso	
P8	Geometria Molecular	Forças de van der Waals	Concentração Micelar Crítica	
P9	Polaridade	Estrutura Molecular	Miscibilidade Água/Óleo	
P10	Líquidos	Ligação de Hidrogênio	Líquidos iônicos	

*Conceitos citados por mais da metade dos entrevistados

Considerando os conceitos em destaque de cada entrevista, que estão relacionados com a pertinência e ênfase com que os pesquisadores citaram os termos em 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 em um 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 os mesmos 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 como 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.

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 transcrito 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 das mesmas, 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 1, 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 as forças dispersivas (dipolo induzido-dipolo induzido) e o terceiro as 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 1. Energia de interação 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 de 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, que podem ser 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)

CONSIDERAÇÕES FINAIS

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. Logo depois, 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 são capazes de evidenciar os principais parâmetros de cada interação, além do caráter aditivo e da visão unificada das interações.

Muitas das percepções dos pesquisadores, relacionadas ao caráter universal das interações dispersivas, aditividade das interações, magnitude das energias de interação e a correlação entre parâmetros moleculares e propriedades físico-químicas

dos sistemas químicos, estão em conformidade com pesquisas da área de ensino de química (GOTTSCHALK E VENKATARAMAN, 2014; GLAZIER; MARANO, 2010; MURTHY, 2006).

Os resultados do presente trabalho 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.

REFERÊNCIAS

BARDIN L. **Análise de conteúdo**. 4 ed. Lisboa: Edições 70; 2009.

DA-SILVA, D.C.; QUADROS, A. L.; RODRIGUES, S. B. V. 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.

DA SILVA JÚNIOR, J. N. et al. Interactions: design, implementation and evaluation of a computational tool for teaching intermolecular forces in higher education, **Química Nova**, v. 38, n. 10, p. 1351-1356, 2015.

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.

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

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.

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.

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

MAYRING, P. *Einführung in die qualitative Sozialforschung [Introdução à pesquisa social qualitativa: Uma orientação ao pensamento qualitativo]*. 5. ed. Weinheim: Beltz, 2002.

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

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.