



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO ACADÊMICO DO AGRESTE
DEPARTAMENTO DO NÚCLEO DE FORMAÇÃO DOCENTE
CURSO DE QUÍMICA - LICENCIATURA

LUÍS HENRIQUE RAIMUNDO

**ABORDAGEM CONCEITUAL DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO DOS DISCENTES
DE UM CURSO DE QUÍMICA - LICENCIATURA**

Caruaru

2021

LUÍS HENRIQUE RAIMUNDO

**ABORDAGEM CONCEITUAL DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO DOS DISCENTES
DE UM CURSO DE QUÍMICA – LICENCIATURA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Química – Licenciatura da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Química.

Área de concentração: Ensino de Química e Química Inorgânica.

Orientadora: Prof^a. Dra. Jane Maria Gonçalves Laranjeira.

Caruaru

2021

Catálogo na fonte:
Bibliotecária – Maria Regina Borba - CRB/4 - 2013

R725a Raimundo, Luís Henrique.
Abordagem conceitual da Ligação de Hidrogênio dos discentes de um curso de Química – Licenciatura. / Luís Henrique Raimundo. – 2021. 95 f.; il.: 30 cm.

Orientadora: Jane Maria Gonçalves Laranjeira.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Universidade Federal de Pernambuco, CAA, **Química – Licenciatura**, 2021.
Inclui Referências.

1. Ligação de hidrogênio. 2. Moléculas – Ligações químicas. 3. Química da água. 4. Ensino superior. I. Laranjeira, Jane Maria Gonçalves (Orientadora). II. Título.

CDD 371.12 (23. ed.)

UFPE (CAA 2021-202)

LUÍS HENRIQUE RAIMUNDO

**ABORDAGEM CONCEITUAL DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO DOS DISCENTES
DE UM CURSO DE QUÍMICA - LICENCIATURA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Química – Licenciatura da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Química.

Aprovada em: 02/09/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof^a. Dra. Jane Maria Gonçalves Laranjeira (Orientadora)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^o. Dr. José Ayrton Lira dos Anjos (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^a. Dra. Ana Paula Freitas da Silva (Examinadora Interna)
Universidade Federal de Pernambuco

Dedico esse trabalho a minha mãe por todo o apoio durante este período da minha graduação, ao meu pai que desde muito cedo me incentivou a continuar meus estudos, e aos demais familiares e amigos, por estarem sempre torcendo e contribuindo com os meus avanços.

AGRADECIMENTOS

Início este texto de agradecimento olhando para o céu e agradecendo primeiramente a Deus por todas as conquistas obtidas no decorrer do meu curso. Foram entre trabalhos, seminários, provas, entre outras atividades que superei os meus próprios limites e hoje me encontro nessa evolução constante. Aliás, esta é a única certeza que devemos ter, a evolução.

O meu processo de desenvolvimento no ambiente escolar começou desde muito cedo, pois meus pais sempre me instigaram bastante a estudar e buscar por mais conhecimento, segundo eles está é a melhor forma de você se tornar diferente e ajudar outras pessoas. Então, através desse imenso estímulo agradeço aos meus pais, inclusive por confiarem no meu potencial e arcar com as despesas relacionadas a cada curso que realizei, destacando que ainda quero fazer muito mais.

Em relação a confiar no meu potencial, também enfatizo a minha orientadora Prof.^a Dra. Jane Maria Gonçalves Laranjeira que me ensinou em diversos componentes curriculares, sendo um destes a Química Inorgânica, onde através dele surgiu a ideia do tema deste trabalho. Dessa forma, agradeço por toda paciência a cada trabalho já publicado, e por mais este, que foi bastante complexo, mas consegui avançar um pouco a cada uma das suas orientações, e concluí-lo. Agradeço muito mais, pois em meio as suas situações pessoais esteve sempre presente para me auxiliar no desenvolvimento do trabalho.

Além da minha orientadora, também agradeço aos demais professores, Ana Paula Freitas, Ana Paula Souza, Ayrton, Roberto, Ricardo, Regina, Roberta Dias, Roberta Félix, Girleide, Flávia, Leonardo, Juliana, entre outros, que em meio aos componentes curriculares, grupos de pesquisa, e demais atividades da universidade, contribuíram para o meu desenvolvimento acadêmico durante o curso.

Também incluo nos meus agradecimentos os meus irmãos que apresentaram disposição para me ajudar em qualquer situação dos meus estudos. Pois, quando o transporte universitário faltava, recorria a eles para chegar até a universidade e realizar as atividades daquele dia. Destaco também o incentivo oferecido por cada um deles e os demais familiares para chegar até o final da minha graduação.

Em relação ao incentivo, agradeço aos meus amigos do curso, visto que era uma ação recíproca. Pois, as vezes chegava cansado de passar a noite estudando, ou até por passar o dia todo realizando alguma atividade acadêmica, e encontrava em

meio a estes colegas um descanso para mente, através de brincadeiras ou conversas aleatórias.

Em meio a tantos amigos que fiz na universidade, destaco: Natália, Kilma, Isabela, Anna, Geysiele, Djalma, Caio, Hellen, Renan, Klebson, Arthur, Camilla, Gilberto e Ítalo, que realizaram atividades acadêmicas comigo. Sei que nem todo momento a harmonia estava presente, devido as grandes demandas que tínhamos, porém chegávamos a um consenso. E isso me ajudou a desenvolver o meu lado humano, tão importante quanto o profissional.

Além dos amigos do curso também encontrei amizades no transporte universitário, e enfatizo: Bya, Barbara, Vicente, Eloisa, Jaíne, Jéssica Pereira, Maurício, Robson, Rodrigo, Vitória, Thaís Manfredini, Thaís Lima, Aurenice, Roseane, Lucyla, Drielli, Jéssica Almeida, entre outros, que estavam comigo nas idas e vindas para a universidade. Entre este percurso ocorriam diversas conversas que contribuíam para diminuir o cansaço daquele dia, além da diversão. Lembro dos momentos em que cheguei doente e pegava os comprimidos com eles, e também dos problemas relacionados ao transporte, principalmente quando um tinha prova. Tudo isso demonstrava os cuidados que a gente tinha um com o outro, semelhante a uma família. Assim, agradeço imensamente a essa turma.

Também coloco nestes agradecimentos os meus amigos fora do meio acadêmico que em todo momento estavam comigo, proporcionando incentivo e compreendendo as minhas situações, ocasionadas muitas vezes pela demanda de atividades da faculdade.

Por fim, agradeço aos demais que não citei, mas que contribuíram de alguma forma para a minha evolução acadêmica, pois não foram poucos, porém importantes.

“Em nossa grande história de mistério não há problemas resolvidos e solucionados para sempre” (EINSTEIN E INFELD, 1976, p. 39 apud GOULART, 2005, p. 3).

RESUMO

Diante da abundância da água existente no planeta Terra, se faz necessário cada vez mais o avanço em pesquisas que estejam intrinsecamente relacionadas com esta substância. Dessa forma, ao analisa-la através da ciência Química, no nível microscópico, se encontra a presença predominante de uma interação que proporciona a existência da água nos estados sólidos e líquidos, denominada como ligação de hidrogênio. Esta interação é abordada nos níveis de Ensino Básico e Superior, porém com perspectivas diferenciadas considerando o nível de cada ensino. No Ensino Superior a ciência Química é repleta de modelos conceituais que servem como base para compreensão dos processos que a integra, essa afirmação se adequa ao modelo de ligação de hidrogênio, visto que o mesmo explica a ligação entre as moléculas de água, substância presente em variados processos químicos e em fenômenos naturais que possibilitam a vida em nosso planeta tal qual conhecemos. Então, considerando essa discussão, este trabalho possui como objetivo analisar as interpretações conceituais sobre a ligação de hidrogênio dos discentes ingressantes e do oitavo período de um curso de formação docente em Química, sendo subsidiado pela identificação das interpretações dos discentes ingressantes e do oitavo (8º) período do referido curso e a descrição comparativa de convergências e divergências existentes nas produções desses dois grupos destacados. Então, realizou-se uma revisão literária a fim de auxiliar na discussão das informações obtidas, abordando-se as interações intramoleculares (Ligação Iônica, Covalente e Metálica) e as interações intermoleculares (Interações de Van Der Waals, incluindo a ligação de hidrogênio); o processo de ensino e aprendizagem das interações intermoleculares nos níveis de Ensino Básico e Superior; os processos cognitivos e metacognitivos na apropriação desse conceito e suas implicações, destacando as suas interferências no processo autônomo de aprendizagem do estudante; e por fim, a conceituação da ligação de hidrogênio segundo publicações científicas e referenciais bibliográficos da Química Inorgânica, mencionando definições de alguns cientistas como: Linus Pauling e a IUPAC uma comissão que engloba a pesquisa de diversos cientistas. Em seguida, ocorreu a coleta de dados desempenhada através da aplicação de um questionário semiestruturado para os dois grupos determinados na pesquisa, composto por diversas questões, onde uma destas solicitava aos discentes a sua definição acerca da ligação de hidrogênio. Com as respostas dessa questão discursiva realizou-se a

análise de conteúdo, identificando em cada definição as suas proximidades com o conceito da IUPAC, categorizando as respostas como “correta”, “parcialmente correta” e “incorreta”. Em relação aos discentes ingressantes, as interpretações conceituais foram equivocadas e sem aprofundamentos científicos, enquanto que em algumas respostas dos discentes do oitavo período foram identificados diversos aspectos que aproximaram as interpretações do conceito da IUPAC. Portanto, demonstrando que durante a graduação, no curso de formação docente em Química, ocorre uma abordagem conceitual de ligação química que permite aprimorar, mesmo que em alguns casos parcialmente, o conhecimento dos discentes, porém alguns aspectos devem ser mais discutidos no processo de ensino e aprendizagem do conceito de ligação de hidrogênio.

Palavras-chave: Ligação de Hidrogênio. Interações Intermoleculares. Ligação de Hidrogênio no Ensino Superior.

ABSTRACT

Given the abundance of water on planet Earth, it is increasingly necessary to advance research that is intrinsically related to this substance. Thus, when analyzing it through the science of chemistry, at the microscopic level, we find the predominant presence of an interaction that provides the existence of water in solid and liquid states called hydrogen bonding. This interaction is addressed in Elementary and College Education levels, but with different perspectives considering the level of each education. In College, chemistry science is full of conceptual models that serve as a basis for understanding the processes that it integrates. This statement fits the hydrogen bond model since it explains the connection between water molecules, a substance present in several chemical processes, and natural phenomena that allow life on our planet as we know it. Therefore considering this discussion, this work aims to identify and analyze the conceptual interpretations of hydrogen bonding of students in the beginning and the eighth period of a teacher training course in chemistry, being subsidized by the identification of the interpretations of students in the beginning and the eighth (8th) period of the course and the comparative description of convergences and divergences in the productions of these two highlighted groups. Then, a literature review was carried out to assist in the discussion of the information obtained, addressing the intramolecular interactions (Ionic, Covalent, and Metallic bond) and the intermolecular interactions (Van Der Waals interactions, including hydrogen bond); the teaching and learning process of intermolecular interactions in the Basic and College Education levels; the cognitive and metacognitive processes in the appropriation of this concept and their implications, highlighting their interferences in the autonomous learning process of the student; and finally, the conceptualization of hydrogen bonding according to scientific publications and bibliographic references of Inorganic Chemistry, mentioning definitions by some scientists such as Linus Pauling and IUPAC a commission that encompasses the research of several scientists. Afterwards, data collection occurred through the application of a semi-structured questionnaire for the two groups determined in the research, composed of several questions, where one of them asked the students their definition of hydrogen bonding. With the answers to this discursive question, a content analysis was performed, identifying in each definition its proximity to the IUPAC concept, categorizing the answers as "correct," "partially correct," and "incorrect. Concerning the beginning students, the conceptual

interpretations were erroneous and without scientific deepening, while in some answers of the eighth period students several aspects were identified that brought the interpretations closer to the IUPAC concept. Therefore, demonstrating that during the undergraduate course in the course of teacher training in chemistry, a conceptual approach to chemical bonding occurs that allows improvement, even if in some cases partially, the knowledge of the students, but some aspects should be discussed further in the process of teaching and learning the concept of hydrogen bonding.

Keywords: Hydrogen Bonding. Intermolecular Interactions. Hydrogen Bonding in Higher Education.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Ilustrações dos arranjos estruturais das substâncias químicas: iônica (a), molecular (b) e metálica (c)	24
Figura 2 –	Diagrama com as faixas de energias das interações intermoleculares e intramoleculares	28
Figura 3 –	Representação das variáveis do momento de dipolo	32
Figura 4 –	Energia potencial e disposição do átomo de H entre os dois átomos nos íons (a) $[\text{FHF}]^-$ e (b) $[\text{ClHCl}]^-$	46
Figura 5 –	Estrutura cristalina do gelo	47
Figura 6 –	Organização da ligação de hidrogênio simétrica entre o íon $[\text{NH}_4]^+$ com NH_3 e as moléculas de ácido carboxílico com o respectivo ânion	50

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 –	Descrição dos tipos de ligações químicas	24
Quadro 2 –	Descrições matemáticas para o cálculo de energia das interações intermoleculares	29
Quadro 3 –	Aspectos da monitorização cognitiva	38
Quadro 4 –	Critérios da ligação de hidrogênio proposto pela IUPAC (ARUNAN <i>et al.</i> , 2011, tradução nossa)	53
Quadro 5 –	Respostas dos discentes identificando a interação predominante entre as moléculas de água	61
Quadro 6 –	Resposta correta do discente do oitavo período conceituando a ligação de hidrogênio	67
Quadro 7 –	Respostas parcialmente corretas dos discentes do oitavo período conceituando a ligação de hidrogênio	69
Quadro 8 –	Respostas incorretas dos discentes do oitavo período conceituando a ligação de hidrogênio	71
Quadro 9 –	Ilustrações da ligação de hidrogênio produzida pelos discentes ingressantes	76
Quadro 10 –	Ilustração da ligação de hidrogênio produzida pelo discente do oitavo período que conceituou a ligação de hidrogênio e foi classificada na categoria “correta”	81
Quadro 11 –	Ilustrações da ligação de hidrogênio produzidas pelos discentes do oitavo período que conceituaram a ligação de hidrogênio e foi classificada na categoria “parcialmente correta”	82
Quadro 12 –	Ilustrações da ligação de hidrogênio produzidas pelos discentes do oitavo período que conceituaram a ligação de hidrogênio e foi classificada na categoria “incorreta”	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Tipos de sólidos cristalinos	25
Tabela 2 –	Entalpia das ligações de hidrogênio e ligações covalentes com os respectivos elementos químicos (kJ/mol)	44
Tabela 3 –	Valores típicos para a entalpia de dissociação da ligação de diferentes tipos de ligações de hidrogênio. Sendo calculados para as espécies em fase gasosa	49

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADN	Deoxyribonucleic Acid (Ácido Desoxir-ribonucleico)
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry (União Internacional de Química Pura e Aplicada)
RNA	Ribonucleic Acid (Ácido Ribonucleico)
SI	Sistema Internacional de Unidade
UFMG	Universidade Federal de Minas Gerais
VSEPR	Valence Shell Electron Pair Repulsion (Repulsão Eletrônica entre os Pares de Elétrons na Camada de Valência)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	OBJETIVOS	21
2.1	OBJETIVO GERAL	21
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	21
3	REFERENCIAL TEÓRICO	22
3.1	INTERAÇÕES INTRAMOLECULARES E INTERMOLECULARES	22
3.2	PROCESSO DE ENSINO E APRENDIZAGEM DAS INTERAÇÕES INTERMOLECULARES	30
3.3	PROCESSOS COGNITIVOS E METACOGNITIVOS NA APRENDIZAGEM DE CONCEITOS	35
3.4	CONCEITUAÇÃO DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO SEGUNDO PUBLICAÇÕES CIENTÍFICAS E REFERENCIAIS BIBLIOGRÁFICOS DA QUÍMICA INORGÂNICA	40
4	METODOLOGIA	56
4.1	A TIPOLOGIA DO ESTUDO	56
4.2	SUJEITO E CAMPO DA PESQUISA	56
4.3	COLETA DE DADOS	57
4.3.1	Questionário	58
4.4	ANÁLISES DE DADOS	59
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	60
6	CONCLUSÃO	90
	REFERÊNCIAS	92

1 INTRODUÇÃO

O Ensino Superior de Química se utiliza de modelos conceituais que servem como base para compreensão de processos e fenômenos naturais ou produzidos pela e para a humanidade. Sendo dessa forma ao mesmo tempo objeto e instrumento de estudo nesses cursos. Neste contexto se incluem os cursos de formação docente que abordam os conceitos desta Ciência de acordo com interpretações de diversos autores citados nos referenciais bibliográficos dos respectivos componentes curriculares. Contudo, no decorrer desta formação podem ocorrer equívocos na interpretação de um determinado conceito pelos discentes quando diante das abordagens diferenciadas propostas nestes referenciais, como no caso do modelo conceitual da ligação de hidrogênio, que é vivenciado durante toda a formação docente inicial para compreensão de alguns fenômenos naturais no contexto interdisciplinar da ciência Química. Diante disso, levantou-se o seguinte problema de pesquisa: Como os discentes, ingressantes e do oitavo (8º) período, num curso de formação docente em Química no Agreste de Pernambuco interpretam o modelo conceitual da ligação de hidrogênio na perspectiva do seu estado da arte atual.

No Projeto Pedagógico do referido curso de formação docente em Química o modelo conceitual da ligação de hidrogênio pode ser abordado no contexto do ensino e aprendizado de diversos componentes curriculares, dentre eles: Introdução à Química, Química Geral I e II, Química Inorgânica I e Química Orgânica I, tratando-o de forma direta (com a abordagem do conceito) ou indireta (utilizando-o como forma de explicar e contextualizar alguns fenômenos físico-químicos). Assim, através da análise deste projeto determinou-se que o oitavo período corresponde a um semestre do curso que seus respectivos componentes curriculares não possibilitam alterações nas interpretações conceituais dos discentes acerca de ligação de hidrogênio, logo o conhecimento construído ao longo da formação sobre esta interação até este período corresponde ao que será abordado na vida profissional do mesmo.

Dentre os referenciais bibliográficos que irão subsidiar a fundamentação teórica sobre a ligação de hidrogênio se destacam aqueles adotados na bibliografia principal da ementa do componente curricular “Química Inorgânica I” (60h), obrigatório e ofertado no quarto período do referido Curso, que são: “Química Inorgânica não tão concisa” (John D. Lee, 1999) e “Química Inorgânica” (Shriver, D.; Atkins, P., 2008). Apesar de existir edições mais recentes destes referenciais bibliográficos estas foram

as edições que compunham o acervo da biblioteca institucional no contexto deste estudo.

De acordo com um estudo mais atual publicado por Raimundo, Silva e Laranjeira (2018), as diferentes formas de abordagens apresentadas nestes referenciais bibliográficos sobre este modelo de ligação contribuiu para a ocorrência de dificuldades na compreensão dos discentes associadas à forma como esta discussão se apresenta nestas obras, com descritores qualitativos equivocados no contexto científico atual e ausência de parâmetros e critérios considerados necessários para caracterizar este tipo de interação, como aqueles definidos recentemente pela Comissão Internacional da Química Pura e Aplicada (IUPAC, 2011, do inglês *International Union of Pure and Applied Chemistry*).

A importância da compreensão mais aprofundada dos discentes sobre a ligação de hidrogênio, na formação docente inicial, possibilitando a sua identificação em meios e processos físico-químicos, é pautada no fato de que diversos fenômenos naturais e processos industriais, no âmbito da Química e demais ciências, utilizam-se dela para sua explicação. Como exemplo, pode-se citar o valor elevado da temperatura de evaporação da substância química água (H_2O) quando comparado com os valores destas mesmas temperaturas dos demais hidretos dos elementos do Grupo 16. Segundo Desiraju (2011, tradução nossa), a substância química água é constituída por moléculas que interagem, nos estados sólido e líquido, através da ligação de hidrogênio, conferindo-lhe propriedades características que são de extrema importância para a vida no nosso planeta.

Consequentemente, este modelo de ligação se insere entre os conhecimentos necessários que devem ser abordados no processo de ensino e aprendizagem, no Ensino Básico e Superior, justificando-se a indispensabilidade de trabalhar este conceito de forma aprofundada, contextualizada e interdisciplinar, nos cursos de formação docente em Química, e ciências correlatas, com identificação dos parâmetros e critérios que permitem caracterizar uma dada interação como ligação de hidrogênio.

Segundo a IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), a evidência para a formação da ligação de hidrogênio ($X-H\cdots Y-Z$) pode ser tanto experimental quanto teórica, ou, idealmente, uma combinação de ambas. Ainda de acordo com este referencial a ligação de hidrogênio é definida como uma interação atrativa entre um átomo de hidrogênio – de uma molécula ou fragmento molecular ($X-H$), onde X possui

maior eletronegatividade em relação a H – e um átomo, ou um grupo de átomos, na mesma ou em outra molécula diferente, em que há evidência de formação de ligação. Destaca ainda que o átomo, ou o grupo de átomos, que interage com o H constitui-se de uma região rica em elétrons, mas sem se limitar à pares de elétrons isolados de átomos ou sistemas π .

Sendo assim, este Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) possui como objetivo analisar as interpretações conceituais sobre a ligação de hidrogênio dos discentes de um curso de formação docente em Química ao longo do seu processo formativo, sendo subsidiado pela identificação das interpretações dos discentes ingressantes e do oitavo (8^o) período do referido curso e a descrição comparativa de convergências e divergências existentes nas produções desses dois grupos destacados. No âmbito desta discussão também se levou em consideração a influência de dois processos importantes na aprendizagem dos conceitos químicos:

- PROCESSOS COGNITIVOS que se referem ao aperfeiçoamento intelectual do discente proporcionando, por meio de ações mentais, a compreensão acerca das atividades realizadas e dos seus produtos ou o autoajuste do avanço racional, de acordo com suas tomadas de decisões. Ou seja, esse processo está relacionado à capacidade de aprendizagem do indivíduo (BEBER, B.; SILVA, E.; BONFIGLIO, S. U. (2014)).

- PROCESSOS METACOGNITIVOS que dizem respeito à reflexão pessoal sobre a organização e planificação da ação do sujeito, com relação à consciência de como se dá a sua aprendizagem e qual o trajeto que deve ser percorrido até o conhecimento. Portanto, a metacognição está relacionada com o autoconhecimento do indivíduo sobre o seu processo de aprendizagem e com a regulação para a eficácia desse processo (BEBER, B.; SILVA, E.; BONFIGLIO, S. U. (2014)).

No decorrer desta monografia também serão apresentadas as discussões teóricas sobre a ligação de hidrogênio abordadas nos seguintes referenciais bibliográficos da Química Inorgânica no Ensino Superior – D. Lee (1991) e Shriver; Atkins (2010) já destacados anteriormente – além de outros selecionados neste estudo: Steiner (2002), Housecroft; Sharpe (2012) como também em publicações científicas mais atualizadas que fundamentarão as discussões sobre este modelo de ligação no âmbito deste estudo. Na metodologia estão descritas as ações propostas para obtenção das interpretações conceituais dos discentes, seguida de análise e identificação das categorias, detalhadas de acordo com os resultados obtidos na

pesquisa, e concluída com o conhecimento acerca da interpretação do que é a ligação de hidrogênio expresso pelos discentes participantes do estudo, ingressantes e do oitavo período, na sua formação docente inicial.

Levando-se em consideração os pressupostos discutidos anteriormente e que o campo de investigação deste estudo é a comunidade acadêmica de um Curso de Formação Docente numa Instituição Pública da Mesorregião do Agreste Pernambucano, espera-se impactar tanto o Ensino Médio de Química, no âmbito local e regional, quanto a comunidade acadêmica em geral. Uma vez que, ao conhecer as interpretações conceituais sobre a ligação de hidrogênio construídas pelos discentes ao longo do seu processo formativo, serão fornecidos subsídios sobre quais dos aspectos conceituais desta ligação precisam ser destacados no processo de ensino e aprendizagem, almejando-se, assim, que os equívocos verificados a partir deste estudo não perpetuem-se nos diversos níveis de Ensino (Básico e Superior) onde os conteúdos da Química são ministrados.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Analisar as interpretações conceituais sobre a ligação de hidrogênio dos discentes ingressantes e do oitavo período de um curso de formação docente em Química.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar as interpretações conceituais da ligação de hidrogênio dos discentes ingressantes e do oitavo (8º) período de um curso de formação docente em Química.
- Descrever as convergências e divergências existentes nas interpretações conceituais dos discentes, ingressantes e do 8º período do referido Curso, sobre este modelo de ligação.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

Nesta seção será apresentado uma discussão acerca de diversos referenciais teóricos que abarcam os seguintes temas: Interações intramoleculares e intermoleculares, o processo de ensino e aprendizagem das interações intermoleculares, os processos cognitivos e metacognitivos na aprendizagem de conceitos e, por fim, a conceituação da ligação de hidrogênio segundo os referenciais bibliográficos selecionados da Química Inorgânica e publicações científicas sobre este modelo de ligação. Todos servirão de base para discussão dos dados obtidos na pesquisa deste TCC.

3.1 INTERAÇÕES INTRAMOLECULARES E INTERMOLECULARES.

A matéria, objeto de estudo da ciência Química, é o material físico do universo. Na atualidade existe uma imensa variedade de matéria pura (natural e sintética), as denominadas substâncias químicas que são formadas a partir da combinação dos elementos químicos que ocorrem naturalmente no nosso planeta (com número atômico variando de 1 a 92), com exceção dos elementos tecnécio ($Z=43$) e promécio ($Z=61$), resultando em diferentes formas e arranjos estruturais, definidos pelas propriedades atômicas dos átomos combinados (tipo e quantidade) e condições termodinâmicas.

A combinação dos elementos químicos, ou ligação química, é resultado da força atrativa entre átomos ou íons que resulta na formação das substâncias químicas elementares ou compostas se constituídas, respectivamente, por átomos de um mesmo elemento químico ou de elementos químicos diferentes. Estas ligações químicas podem ocorrer como resultado das forças de atração eletrostática entre íons com cargas opostas, (ligação iônica) ou pelo surgimento de uma região com densidade eletrônica relativamente alta entre os núcleos e que resulta, pelo menos parcialmente, do compartilhamento de elétrons e dá origem a uma força atrativa com distância internuclear característica, (ligação covalente) ou ainda quando átomos de metais fluem livremente por uma camada cristalina bem definida e tem seus elétrons deslocalizados na forma de uma “nuvem eletrônica” denominada “mar de elétrons”, (ligação metálica). Em termos estritos, uma ligação iônica se refere à atração eletrostática experimentada entre as cargas elétricas de um cátion e um ânion, em contraste com uma ligação puramente covalente. Na prática, é preferível considerar a

quantidade de caráter iônico de uma ligação em vez de se referir a ligações puramente iônica ou covalente atrelada a diferença da eletronegatividade dos átomos que participam da ligação.

No primeiro caso formam-se as substâncias iônicas enquanto no segundo as substâncias moleculares. No Compêndio de Terminologia Química da IUPAC encontra-se a descrição transcrita a seguir, com tradução nossa, sobre a formação da ligação covalente que caracteriza uma entidade molecular:

Quando as forças atuantes entre dois átomos, ou grupo de átomos, resultam na formação de uma entidade molecular, independente e estável, considera-se a existência da ligação química entre os átomos ou grupos de átomos. A principal característica da formação da ligação molecular é a existência de uma região entre os núcleos com contornos de potenciais constantes [...] (IUPAC, p. 257, 2014, tradução nossa).

Neste Compêndio “entidade molecular” é o termo geral usado para designar entidades singulares, independentemente de sua natureza, enquanto o termo “espécies químicas” faz referência ao conjunto de entidades moleculares, ou seja, é o equivalente da entidade molecular em escala macroscópica.

De forma abrangente as ligações químicas podem ser explicadas pela Teoria Quântica, mas, no Ensino Médio e Superior, podem ser modeladas, de forma mais simplificada e pontual, pela “Regra do Octeto” e pela Teoria da Repulsão Eletrônica entre os Pares de Elétrons na Camada de Valência (VSEPR, sigla *Valence Shell Electron Pair Repulsion*, em inglês) que possibilita aos químicos fazer previsões sobre a força, a direcionalidade e a polaridade das ligações. Na atualidade existem teorias mais sofisticadas tais como: “Teoria da ligação de valência”, que inclui hibridização orbital e ressonância e “Teoria do orbital molecular”, que inclui a combinação linear de orbitais atômicos e a teoria de campo de ligante. A eletrostática é usada para descrever as polaridades das ligações e os efeitos que elas têm sobre as substâncias químicas. A força das ligações químicas varia consideravelmente existindo as ligações “fortes” ou “primárias” tais como as ligações iônicas e covalentes, já destacadas anteriormente além das ligações metálicas. No Quadro 1, apresentado a seguir, tem-se um resumo descritivo acerca das tipologias das ligações químicas primárias (BROWN; LEMAY; BURSTEN, 2005):

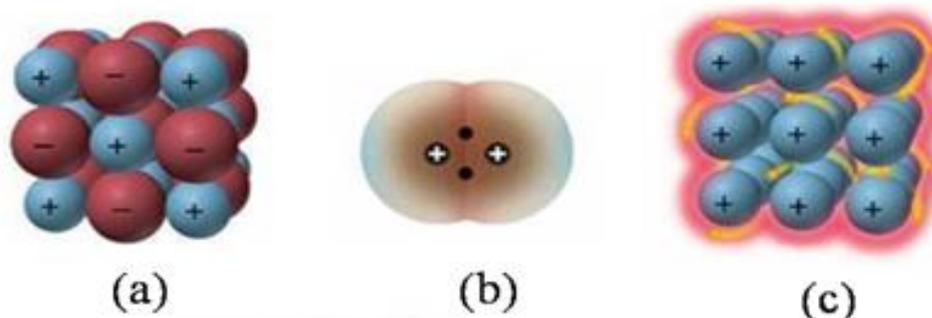
Quadro 1 - Descrição dos tipos de ligações químicas.

Tipo de Ligação Química	Descrição
Iônica	Resulta de forças eletrostáticas existentes entre os íons de cargas e sinais antagônicos, ocorrendo geralmente entre os átomos de metais e ametais que realizam a transferência de elétrons entre eles.
Covalente	Ocorre com o compartilhamento de elétrons entre os núcleos dos átomos envolvidos na ligação. Ocorrem entre ametais e o hidrogênio.
Metálica	Neste tipo de ligação os elétrons encontram-se relativamente livres por toda estrutura tridimensional do arranjo metálico, como no caso da estrutura cristalina cúbica de faces centradas do Alumínio (Al) e do Cobre (Cu) e cúbica de corpo centrado do Ferro (Fe).

Fonte: Adaptação de BROWN, LEMAY, BURSTEN (2005).

Na Figura 1 pode-se visualizar uma representação esquemática, no nível atômico-molecular e invisível do conhecimento químico, dos arranjos estruturais das substâncias químicas: iônica (a), covalente (b) e metálica (c):

Figura 1 - Ilustrações dos arranjos estruturais das substâncias químicas: iônica (a), molecular (b) e metálica (c).



Fonte: Adaptado de chem.fsu.edu/chemlab/chm1046course/interforces.html (s.d.).

Correlacionando estas representações esquemáticas reproduzidas na Figura 1 com as informações contidas no Quadro 1 pode-se definir que a ilustração: (a) Corresponde ao arranjo cristalino resultante da interação eletrostática entre íons com cargas de sinais opostos (ligação iônica). (b) Representa o arranjo molecular discreto resultante da ligação covalente formada pelo compartilhamento de um par de elétrons (representados por dois pontos pretos) por dois núcleos atômicos de hidrogênio (H) na molécula (H_2). Neste caso, como os dois átomos têm a mesma eletronegatividade,

não existe polarização da nuvem eletrônica e a molécula é apolar. (c) Corresponde ao arranjo reticular resultante da ligação entre átomos metálicos (ligação metálica). Segundo Shriver; Atkins (2010, p. 93) este tipo de ligação nos metais surge quando cada átomo perde um ou mais elétrons para um “mar de elétrons” comum (ou seja, na forma de uma nuvem de elétrons deslocalizados). A força da ligação resulta das atrações combinadas entre esses elétrons movendo-se livremente e os cátions resultantes. Assim pode ser descrito como o compartilhamento de elétrons livres numa estrutura reticular de íons carregados positivamente (cátions metálicos).

Existem diferentes arranjos estruturais de sólidos cristalinos: iônico, molecular, covalente e metálico. Estes arranjos são definidos pela forma como as partículas unitárias se estruturam a partir das forças atuantes entre elas incluindo, além das ligações químicas primárias, as denominadas interações (ou forças) de Van der Waals que serão abordadas sequencialmente. De acordo com a IUPAC (2014, tradução nossa) cristalinidade é a presença de ordem tridimensional no nível das dimensões atômicas que pode ser detectada por diversas técnicas experimentais, tais como: difração de raios X e medições de calor de fusão, entre outras. Portanto, as partículas unitárias e as forças atuantes entre elas são determinantes das características estruturais e das propriedades destes materiais no estado sólido. Estas especificidades estão resumidas na Tabela 1, adaptada de (UFMG, 2012):

Tabela 1 - Tipos de sólidos cristalinos.

Tipo de sólido	Forma das partículas unitárias	Forças entre as partículas	Propriedades	Exemplos
Molecular	Átomos e moléculas	Forças de dispersão de London, forças dipolo-dipolo e ligações de hidrogênio	Razoavelmente macio, ponto de fusão baixo a moderado, condução térmica e elétrica ruim	Argônio (Ar); metano (CH ₄); sacarose (C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁); Gelo Seco (CO ₂).
Covalente	Átomos ligados em uma rede de ligações covalentes	Ligações Covalentes	Muito duro, pontos de fusão muito altos, geralmente condutores térmicos e elétricos ruins	Diamante (C); quartzo (SiO ₂).
Iônico	Íons positivos e negativos	Atrações eletrostáticas	Duros e quebradiços, alto ponto de fusão, pobres condutores térmicos e elétricos	Sais típicos – por exemplo: NaCl, Ca(NO ₃) ₂ .
Metálico	Átomos	Ligações Metálicas	De macios a muito duros, de baixos a altos pontos de fusão, excelentes condutores térmicos e elétricos, maleáveis e dúcteis.	Todos os elementos metálicos – por exemplo: Cu, Fe, Al, Pt.

Fonte: Reprodução com adaptação de http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?attachment_id=497 (2012).

Observa-se que as forças atrativas do tipo dipolo-dipolo e ligação de hidrogênio entre as partículas unitárias assim como as forças de dispersão de London (atrativas e repulsivas), em conjunto com a energia cinética das mesmas são determinantes do estado físico das substâncias. Com exceção do estado gasoso, cuja energia cinética das partículas é maior que a energia de atração entre elas, nos demais estados (líquido e sólido) predominam as forças de atração entre as partículas unitárias (átomos, íons, moléculas).

A IUPAC (2014, p. 265, tradução nossa) define substância como “matéria de composição constante caracterizada pelas entidades químicas que a compõem (moléculas, fórmulas unitárias, átomos)”. As substâncias químicas são identificadas por suas propriedades físicas específicas (densidade, índice de refração, condutividade elétrica, ponto de fusão etc.). Ainda segundo este referencial, com tradução nossa, o termo “intermolecular” é descritivo de qualquer processo que envolve a transferência (de átomos, grupos de átomos, elétrons etc.) ou interações entre duas ou mais entidades moleculares. Ou seja, as entidades químicas representativas das substâncias moleculares (as moléculas) interagem através de forças (atrativas e repulsivas) sem que ocorram alterações nas ligações químicas que as estruturam.

Segundo Lima, L.S. (2014) interações (ou forças) de Van Der Waals é uma designação genérica para as forças (repulsivas ou atrativas) entre moléculas, ou entre diferentes partes da mesma molécula, excluindo as ligações covalentes. Também se refere às atrações eletrostáticas entre íons e moléculas. Este Autor destaca ainda que as intensidades destas interações são bem mais fracas comparadas com as intensidades das ligações primárias e descreve três contextos específicos em que se manifestam com suas respectivas modelagens conceituais e denominações:

- **FORÇAS DE KEESOM** (ou interações dipolo permanente – dipolo permanente), assim denominadas em homenagem ao físico holandês Willem Keesom que, em 1921, desenvolveu o primeiro modelo matemático destas interações entre moléculas polares. As moléculas polares apresentam, nas suas estruturas, zonas com excesso e com deficiência de densidade eletrônica, constituindo um dipolo elétrico. Sendo assim, este tipo de interação se dá pela atração eletrostática entre as partes positiva e negativa dos dipolos de moléculas diferentes. As ligações de hidrogênio podem ser consideradas um caso particular deste tipo de interação, por conter outros e mais critérios que

devem ser analisados. Portanto, as forças de Keesom (dipolo-dipolo) ocorrem entre moléculas permanentemente polarizadas sendo a interação de Van Der Waals de maior intensidade entre todas, com destaque neste aspecto para a ligação de hidrogênio.

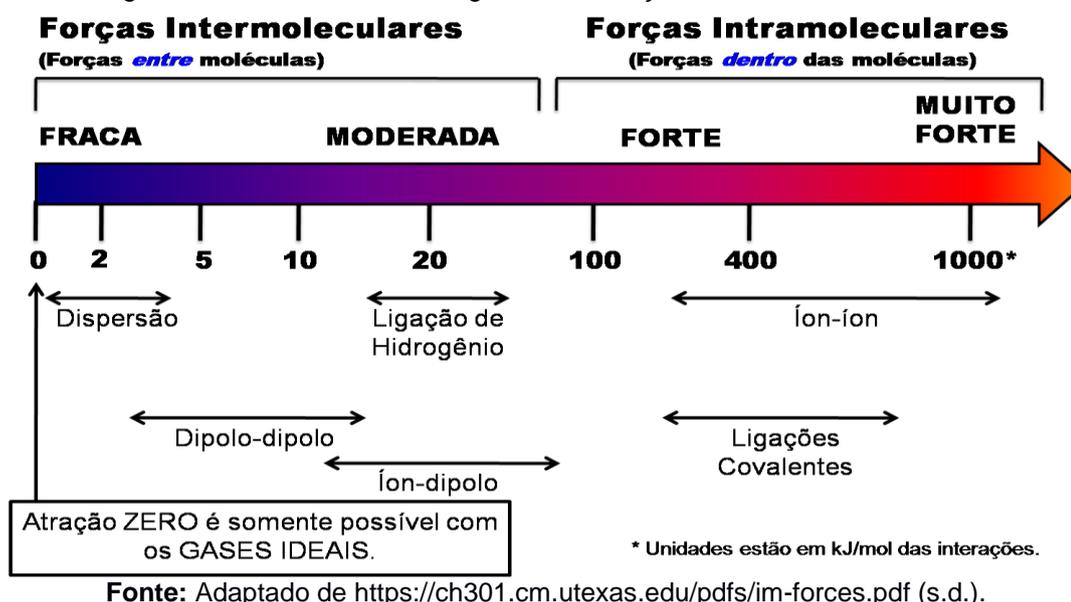
- FORÇAS DE ATRAÇÃO DE DEBYE (ou interações dipolo permanente – dipolo induzido). Esta denominação é uma homenagem ao químico e físico holandês Peter Debye, pelos resultados dos seus estudos, descobertas e descrição matemática do fenômeno com indução de dipolos. Esta interação ocorre quando uma molécula polar se aproxima de uma molécula apolar com a extremidade com excesso de carga da molécula polar podendo induzir o deslocamento dos elétrons numa das extremidades da molécula apolar resultando na formação de um dipolo momentâneo (ou induzido) e consequente atração entre estes dois dipolos. Descrevendo acerca de descritores qualitativos entre essas forças tratadas pelo Autor, pode-se afirmar que as forças de Debye são normalmente mais fracas que as forças de Keesom e mais fortes que as forças de dispersão de London.
- FORÇAS DE DISPERSÃO DE LONDON (ou interações dipolo induzido – dipolo induzido) foram descobertas pelo físico teórico alemão naturalizado norte-americano Fritz London, durante os seus estudos sobre a atração entre dois átomos de um gás nobre, a curta distância um do outro. As forças de London ocorrem simultaneamente às demais interações de Van Der Waals entre moléculas polares e apolares, no entanto, é a única força presente nos sistemas constituídos por moléculas apolares. Existe uma probabilidade elevada de que a carga elétrica esteja distribuída, momentaneamente e de forma assimétrica, numa molécula. Tal fato cria zonas com densidade de carga mais acentuada do que outras, originando um ou mais dipolos. Ao aproximar-se de outra molécula, estes dipolos “autoinduzidos” podem induzir dipolos nessa molécula, originando forças atrativas (e repulsivas) entre elas. Este tipo de interação é a mais fraca de todas as forças de Van Der Waals.

Portanto, estas tipologias de interações intermoleculares ocorrem em determinadas condições diretamente relacionadas com as características estruturais das moléculas constituintes de um dado sistema químico que são responsáveis pelo caráter polar ou apolar destas estruturas, além da polarizabilidade que de acordo com

a IUPAC (2014, tradução nossa) é a facilidade de distorção da nuvem de elétrons de uma entidade molecular quando na presença de um campo elétrico.

Na representação esquemática apresentada na Figura 2 tem-se uma projeção da magnitude das forças existentes nas ligações químicas primárias (intramoleculares) e secundárias (intermoleculares) com as respectivas faixas dos valores das energias destas interações (expressa em kJ/mol). Este parâmetro termodinâmico pode ser usado para fazer uma análise comparativa das forças intermoleculares e intramoleculares caracterizando cada tipo de interação como fraca, moderada, forte e muito forte.

Figura 2 - Diagrama com as faixas de energias das interações intermoleculares e intramoleculares.



Observa-se que as energias das interações intramoleculares, na faixa de valores entre $\approx 10^2$ a 10^3 kJ/mol, as definem nas categorias forte ou muito forte, enquanto que a faixa de valores das energias das interações intermoleculares, inferiores e $\approx 10^2$ kJ/mol as classificam nas categorias moderadas e fracas. Também é importante ressaltar a atração com energia zero somente possível no modelo dos gases ideais. Pode-se ainda afirmar, a partir deste diagrama, que a interação entre íons (Íon-Íon) são as mais fortes com valores de energia situando-se na faixa de ≈ 200 a 1000 kJ/mol enquanto os valores das energias das ligações covalentes situam-se na faixa ≈ 170 a 800 kJ/mol. No caso das interações intermoleculares as forças de dispersão de London são as mais fracas com valores de energia na faixa de $\approx 0,1$ a 4 kJ/mol, seguida da interação dipolo-dipolo (≈ 3 a 15 kJ/mol). A ligação de hidrogênio

(≈ 15 a 60 kJ/mol) abarca a faixa de energia das interações íon-dipolo, mas com limites menores.

O cálculo das energias potenciais (E_P) das interações intermoleculares, de natureza eletrostática, dependem diretamente das intensidades dos dipolos elétricos (μ), da polarizabilidade (α) e varia inversamente com o raio (r) da distância de interação. Estas equações matemáticas distintas para cada tipo de interação estão apresentadas no Quadro 2, conforme (MIRANDA, 2018):

Quadro 2 - Descrições matemáticas para o cálculo de energia das interações intermoleculares.

Tipo de Interação	Descrição Matemática
Interação Dipolo-Dipolo (fase sólida); Ligação de hidrogênio	$E_P \propto -\frac{\mu_1\mu_2}{r^3}$
Interação Dipolo-Dipolo (fase líquida e gasosa)	$E_P \propto -\frac{\mu_1^2\mu_2^2}{r^6}$
Forças de Dispersão de London	$E_P \propto -\frac{\alpha_1\alpha_2}{r^6}$

Fonte: Adaptado de <https://ch301.cm.utexas.edu/pdfs/im-forces.pdf> (s.d.).

Diante desta análise, verifica-se que a energia potencial das interações dipolo-dipolo (fase líquida e gasosa) e as forças de dispersão de London são as que sofrem maior influência do valor raio da interação (r), variando inversamente com a sexta potência do valor estimado de (r), enquanto que a energia potencial das ligações de hidrogênio e das interações dipolo-dipolo (fase sólida) variam com a terceira potência do valor estimado de (r).

Considerando os detalhes específicos destas interações e sua inter-relação com a composição química e arranjo estrutural das moléculas pode-se inferir que o processo de ensino e aprendizagem abordando este conteúdo deve ser totalmente criterioso, expondo as mais diversas situações que as compõem e a melhor forma de classificá-las de forma a minimizar a ocorrência de equívocos conceituais na percepção do docente e do discente durante o processo formativo.

3.2 PROCESSO DE ENSINO E APRENDIZAGEM DAS INTERAÇÕES INTERMOLECULARES.

Identificar o(s) tipo(s) de interação(ões) intermolecular(es) existente(s) em um sistema químico não é uma ação fácil, mas para que seja realizado corretamente exige conhecimentos detalhados das estruturas moleculares envolvidas e especificidades das interações que atuam entre elas podendo ocorrer simultaneamente mais de uma destas interações. Portanto, este conhecimento aprofundado e específico dos sistemas químicos exige uma visão e compreensão ampla dos modelos conceituais específicos que descrevem estas interações e que perpassa pelo processo de ensino e aprendizagem efetuado de forma clara, concisa, interdisciplinar e contextualizado com o cotidiano dos estudantes.

Uma das situações em que as interações intermoleculares estão presentes no contexto dos fenômenos macroscópicos da Química e que se reflete no cotidiano dos estudantes são as mudanças de fases da matéria. Estas mudanças físicas, que dependem de fatores termodinâmicos, são observadas na grande quantidade das substâncias que estão presentes nos ambientes e ecossistemas que nos rodeiam e são dependentes do tipo e das intensidades das interações que ocorrem num dado sistema químico. Como exemplo pode-se citar as mudanças de fases da substância química água (H_2O) à pressão ambiente (1 atm.) cuja fusão e ebulição ocorrem às temperaturas de $0^{\circ}C$ e $100^{\circ}C$, respectivamente, portanto numa faixa ampla de valores diferentemente dos demais calcogenetos de hidrogênio que resulta nas muitas propriedades anômalas da água que podem ser atribuídas a ligações de hidrogênio significativas entre os átomos de hidrogênio e oxigênio.

Como já discutido anteriormente, as propriedades físico-químicas diferenciadas da água, e das substâncias químicas que são importantes para a manutenção da vida no nosso Planeta, são dependentes das forças intermoleculares influenciando muitos aspectos dos sistemas ecológicos, como a quantidade de água no estado líquido no Planeta, a formação de chuvas que regulariza a temperatura em uma determinada região, a constituição do corpo humano que na faixa de temperatura comum na superfície da terra se mantém no estado líquido garantindo as funções biológicas, entre outros. Sendo assim, estas interações devem ser consideradas para se compreender as implicações das propriedades físicas diferenciadas das substâncias nos sistemas químicos, bioquímicos e biofísicos. Deve-se destacar ainda a

importância da abordagem contextualizada e interdisciplinar destas interações no Ensino de Química, mas visualizando o processo como um todo, ou seja, no âmbito do universo microscópico e macroscópico das interações intermoleculares.

Com base nestas considerações pode-se inferir sobre a importância desta abordagem conceitual, interdisciplinar e contextualizada na formação docente inicial, capacitando os futuros professores de Química para desenvolver esta temática, na sua prática docente, sem lacunas na sua própria compreensão.

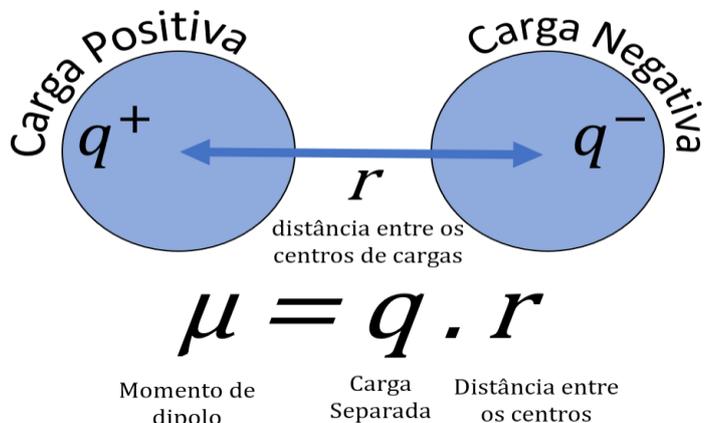
Conforme Seribeli (2019), as dificuldades inerentes ao processo de ensino e aprendizagem deste conteúdo tem sido discutida na literatura levando-se em consideração os problemas na compreensão dos estudantes sobre as correlações entre a estrutura molecular, a polaridade das ligações primárias, a polaridade da molécula e as mudanças físicas das substâncias que são influenciadas pelo tipo de interação intermolecular predominante num dado sistema. Então, evidencia-se que no Ensino Básico, as maiores dificuldades estão relacionadas à: (i) Identificação e representação da estrutura molecular; (ii) Definição da polaridade das ligações intramoleculares nesta estrutura; (iii) A existência de polaridade na molécula, ou a sua ausência, que é definida pelo arranjo espacial e caráter polar das ligações que a estruturam.

Por sua vez a polaridade – das ligações e da molécula – está relacionada com a diferença de eletronegatividade dos elementos ligados resultando na formação de um dipolo elétrico (μ), com densidades de carga negativa e positiva nos elementos mais e menos eletronegativos, respectivamente, numa ligação entre dois átomos (ou diatômica).

Nesta perspectiva, a distribuição simétrica de elétrons numa diatômica homonuclear torna esta ligação apolar (não polar) enquanto numa diatômica heteronuclear a capacidade dos dois átomos para atrair os elétrons na ligação pode ser diferente com estes elétrons sendo atraídos para o átomo mais eletronegativo. Neste caso a ligação é polar e possui um dipolo elétrico. O momento de dipolo numa diatômica heteronuclear (X–Y) é dado pela equação: $\mu = (q \times e \times d)$ em que “d” é a distância entre as cargas pontuais (ou seja, a separação internuclear), “e” é a carga do elétron ($1,602 \times 10^{-19}$ C) e “q” é a carga pontual. A unidade SI é, portanto, Coulomb metro (C.m) mas, por conveniência é expresso em debyes (D) em que $1D = 3,336 \times 10^{-30}$ C.m (HOUSECROFT E SHARPE, 2012, tradução nossa).

A Figura 3 contém uma representação esquemática das variáveis usadas no cálculo do momento de dipolo numa diatômica:

Figura 3 - Representação das variáveis do momento de dipolo.



Fonte: Adaptado de <https://www.quora.com/How-do-I-find-the-dipole-moment> (s.d.).

Estas características das entidades moleculares (eletronegatividade dos átomos, tipo e polaridade da ligação, polaridade da estrutura molecular) são compreendidas e explicadas no âmbito dos seguintes níveis de representação do conhecimento químico: submicro e representacional, enquanto que as propriedades físico-químicas das substâncias são observadas e contextualizadas no nível macro desse conhecimento sem qualquer hierarquia entre eles (JOHNSTONE, 2006, tradução nossa). No entanto, as dificuldades de compreensão da maioria dos estudantes são observadas nos dois primeiros níveis representacionais do conhecimento químico. Segundo Seribeli (2019) as dificuldades no nível de compreensão microscópico do conhecimento químico perpetuam-se ainda para o Ensino Superior.

As interações intermoleculares no Ensino Superior da Química são tratadas nas mais diversas áreas desse conhecimento, como citado por Junqueira (2017), estando contidas, de forma direta ou indireta, nas ementas dos diversos componentes curriculares dos cursos de graduação sendo abordado, inicialmente, no componente curricular “Química Geral” e subsequentemente nos seguintes contextos formativos: (i) “Química Orgânica”, na abordagem das temperaturas de mudança de fase e na solubilidade das substâncias orgânicas; (ii) “Bioquímica” na análise estrutural do ácido ribonucleico (RNA, do inglês: *ribonucleic acid*), do ácido desoxirribonucleico (ADN, do inglês: *deoxyribonucleic acid*) e das proteínas; (iii) Química Analítica, no estudo da técnica de cromatografia; (iv) Físico-Química, com envolvimento no equilíbrio físico,

etc. além de outros contextos que podem abordá-las. Esta sequência também é observada no âmbito da estrutura curricular do Curso de formação docente objeto de investigação neste estudo. Mas, ainda segundo esta Autora, essa fragmentação curricular do conhecimento químico pode dificultar a compreensão aprofundada, interdisciplinar e contextualizada das interações intermoleculares nos níveis microscópico e macroscópico do conhecimento químico. Logo, uma suposta ideia visando melhorar essa compreensão seria através da comunicação entre as diversas áreas curriculares da Química numa abordagem transdisciplinar deste conhecimento.

Nas Diretrizes Curriculares Nacionais para Educação Básica encontra-se uma descrição da transversalidade e da interdisciplinaridade no processo de ensino e aprendizagem na perspectiva de que:

A transversalidade é entendida como uma forma de organizar o trabalho didático-pedagógico em que temas, eixos temáticos são integrados às disciplinas, às áreas ditas convencionais de forma a estarem presentes em todas elas. A transversalidade difere-se da interdisciplinaridade e complementam-se; ambas rejeitam a concepção de conhecimento que toma a realidade como algo estável, pronto e acabado. A primeira se refere à dimensão didático-pedagógica e a segunda, à abordagem epistemológica dos objetos de conhecimento. A transversalidade orienta para a necessidade de se instituir, na prática educativa, uma analogia entre aprender conhecimentos teoricamente sistematizados (aprender sobre a realidade) e as questões da vida real (aprender na realidade e da realidade). Dentro de uma compreensão interdisciplinar do conhecimento, a transversalidade tem significado, sendo uma proposta didática que possibilita o tratamento dos conhecimentos escolares de forma integrada. Assim, nessa abordagem, a gestão do conhecimento parte do pressuposto de que os sujeitos são agentes da arte de problematizar e interrogar, e buscam procedimentos interdisciplinares capazes de acender a chama do diálogo entre diferentes sujeitos, ciências, saberes e temas (BRASIL, 2013, p. 29).

Um dos equívocos bastante comum no ensino e aprendizagem de Química se refere a análise comparativa energética das três categorias de interações intermoleculares descritas anteriormente. Segundo Seribeli (2019), ao explicar a ligação de hidrogênio, a maioria dos docentes tratam-na como o tipo de interação com maior valor energético. Esta informação também é verificada em alguns referenciais bibliográficos do Ensino Superior desta Ciência. Sendo assim pode-se induzir a conclusões equivocadas diante da forma como esta abordagem tem sido feita, de forma generalizada e sem levar em consideração o ambiente químico que propicia a interação intermolecular.

No Ensino Superior de Química, conforme estudo realizado por Raimundo, Silva e Laranjeira (2018) foram identificadas lacunas nos referenciais bibliográficos

indicados na ementa do componente curricular “Química Inorgânica I” na descrição do modelo conceitual da ligação de hidrogênio, sendo ignorados alguns dos critérios que caracterizam este modelo de ligação sem explicitar, de forma clara, a ligação covalente polar entre o hidrogênio e outro elemento químico mais eletronegativo (X–H) concedendo-lhe um caráter ácido (SHRIVER, 2008) ou até concluindo de forma generalizada (D. LEE, 1999) que a ligação em estudo é uma interação de intensidade fraca, sem considerar o contexto químico que se insere. Ainda de acordo com Raimundo, Silva e Laranjeira (2018), os discentes de um Curso de formação docente em Química compreendem a ligação de hidrogênio como uma simples ligação eletrostática entre um átomo de hidrogênio (H) e um outro átomo, sem abordar os seus critérios necessários para a sua caracterização no estado da arte atual.

Essa visão limitada dos discentes, no contexto formativo investigado, pode ter sido causada pela leitura restrita ao modelo conceitual resumido destes referenciais bibliográficos, sem uma análise ampliada e crítica das discussões explicativas, contidas nestes livros e que são necessárias para melhor compreensão deste modelo de ligação com base nos critérios colocados em discussão (RAIMUNDO; SILVA; LARANJEIRA, 2018). Outra situação que compromete a aprendizagem, é a ausência de análises ponderadas dos modelos apresentados pelos diversos referenciais bibliográficos da Química Inorgânica, visto que as interpretações tidas pelos discentes investigados, deste curso de formação docente, foram fundamentadas em referenciais isolados, sem qualquer comparação entre eles. E a partir destas situações os discentes são conduzidos a não compreender de forma eficiente o modelo da ligação de hidrogênio, por não interpretar corretamente todo o processo da sua formação no nível atômico/molecular e termodinâmico. Assim, demonstra-se a importância de retratar os conceitos, refletindo a respeito dos aspectos em que estão incluídos nos processos descritos teoricamente. Além disso, deve-se levar em consideração a defasagem temporal das edições citadas anteriormente e que estão disponíveis na biblioteca do referido Curso.

Considerando a autonomia do discente na sua formação é necessário que o mesmo utilize de dois processos que repercutem consideravelmente nos seus resultados alcançados, sendo estes os processos cognitivos e metacognitivos discutidos a seguir.

3.3 PROCESSOS COGNITIVOS E METACOGNITIVOS NA APRENDIZAGEM DE CONCEITOS.

O ser humano adquire com o passar do tempo diversas habilidades e competências, e todo este processo inicia-se desde o seu nascimento. Conforme Azevedo e Rowell (2009 apud BOFF; ZANETTE, 2010, p. 03) a competência corresponde a capacidade de solucionar de forma pertinente, viável e eficaz diversas situações problemas, utilizando-se inclusive de habilidades. Estas últimas são conceituadas como “um saber fazer, um conhecimento operacional, procedimental, uma sequência de modos operatórios, de analogias, de intuições, induções, deduções, aplicações, transposições”. Deste modo, a competência envolve a movimentação de diversas habilidades que ao se unirem produzem resultados satisfatórios.

Um dos espaços onde se desenvolvem as capacidades citadas acima são as instituições de ensino frequentadas pelos indivíduos ao longo da sua formação, como afirma Boff e Zanette (2010), ao destacar que a vida escolar é um momento de formação humana que envolve o desenvolvimento da convivência social e a aprendizagem dos conhecimentos científicos, tratados de forma sistemática e orientada. Assim, ocorrendo à princípio com atividades elementares, que são aprimoradas ainda na Educação Infantil, até altas capacidades de resolução de problemas propostos pela ciência. Estas últimas aptidões são desenvolvidas durante o processo de ensino e aprendizagem nas instituições de Ensino Médio e Superior.

Segundo Nascimento (2009), a compreensão e reflexão acerca dos problemas sociais e fenômenos naturais, que geram situações que favorecem a construção de hipóteses e abstração, são alguns dos fatores que contribuem para a evolução da aprendizagem do indivíduo, uma vez que os desafios que lhe são propostos ao longo da sua evolução, podem gerar um incentivo para que as suas limitações sejam superadas, favorecendo, dessa forma, o seu crescimento intelectual. Portanto, a partir dessas instigações, tem-se os desafios propostos aos discentes, em seus respectivos anos de estudos, que promovem o desenvolvimento de saberes. Ressalta-se ainda que os conhecimentos científicos no Ensino Médio não têm o mesmo grau de complexidade que no Ensino Superior. Tendo em vista também as situações externas aos ambientes de ensino, pode-se observar que os mesmos saberes exigidos pela

sociedade a um adulto não se igualam aos de uma criança, em virtude do tempo de vivência em determinados espaços que proporcionam conhecimentos.

Convivendo em ambientes escolares os discentes tendem a captar informações que são necessárias para sua apropriação do conhecimento. De acordo com Fonseca (2009) o processo de captação, correspondendo a aproximação da informação com o indivíduo, sendo este precedido pelo de extração das informações, que equivale a separação de um dado específico dos demais contidos na amostra, compreendem ao que se pode chamar de cognição. Ao fazer uso destes dois procedimentos, utiliza-se da capacidade de processar a informação, integra-la e exprimi-la o que caracteriza um processo de apropriação do conhecimento. Levando em consideração este pressuposto, a cognição é compreendida de processos cognitivos que tornam possível a construção do conhecimento, ou seja, a sua acomodação caracterizando uma aprendizagem efetiva.

Os processos cognitivos essenciais para a apropriação do conhecimento são: percepção, memorização, atenção, compreensão, linguagem e reflexão. Segundo Bigge (1977 apud NASCIMENTO, 2009) a memorização, compreensão e reflexão são os responsáveis pelo desenvolvimento do pensamento crítico e reflexivo dos indivíduos. De acordo com essa afirmação as pessoas tornam-se aptas a produzirem opiniões próprias estando, assim, capacitadas para atuarem na sociedade de forma consciente, sem aleatoriedades, mas com razões fundamentadas. São, portanto, indivíduos críticos que utilizam da ciência como base das suas colocações no cotidiano.

Conforme Nascimento (2009), os recursos cognitivos tais como: comparar, interpretar, classificar, memorizar, associar, julgar, hipotetizar, etc., combinados com os níveis cognitivos de compreensão e reflexão, e suas derivações, podem tornar o discente crítico e protagonista do seu processo de aprendizagem. Com esta concepção é perceptível a condução do discente para além do papel de mero receptor de informações possibilitando o processo reflexivo com elaboração de questionamentos sobre determinado problema e buscando respostas para a sua resolução. Neste percurso ele irá se deparar com contextos diversos que o incentivarão a repensar as suas hipóteses, que muitas vezes são colocadas sem qualquer embasamento científico, ocorrendo, assim, a ressignificação de conceitos tidos anteriormente como concretos neste estágio de desenvolvimento cognitivo.

Durante o percurso da ressignificação dos conceitos ocorre diversas remodelações conceituais que podem ser ocasionadas pelas interpretações distintas encontradas nos referenciais bibliográficos acerca do mesmo fenômeno. Neste contexto, para que ocorra a ressignificação, o discente precisa conhecer o conceito, visualizar o evento químico, interpretá-lo, para então refletir acerca da sua definição, que pode ter sido formulada com base em referenciais sem os aprofundamentos necessários para uma aprendizagem efetiva, ou em ensinamentos superficiais.

Em alguns momentos do processo de ensino e aprendizagem os estudantes são instigados através de problematizações orientadas pelo docente. O caminho direcionado pelo professor pode proporcionar ao discente o conhecimento do seu nível de cognição, gerando consciência sobre as aprendizagens efetivadas e as lacunas conceituais ainda persistentes possibilitando a reconstrução do conhecimento pré-existente, compreendendo, assim, um processo de monitoramento. A realização desse processo pode ocasionar reflexões no estudante que irão impactar na sua forma de traçar estratégias para tornar a sua aprendizagem efetiva. Trata-se, pois, de um processo de autorregulação da aprendizagem. Os conhecimentos sobre como se desenvolve a aprendizagem e as reflexões ponderadas durante este percurso, estão integrados no conceito de metacognição. Segundo Flavell (1987, tradução nossa), a metacognição é o conhecimento sobre a capacidade cognitiva do indivíduo, envolvendo o monitoramento e autorregulação desta.

De acordo com Ribeiro (2003), a metacognição diz respeito a diversos procedimentos que interferem nos processos cognitivos. Entre os processos metacognitivos que podem interferir na capacidade intelectual do indivíduo, ou seja, na sua cognição, se destacam a autorregulação do conhecimento, pois capacita o estudante a escolher o(s) melhor(es) processo(s) cognitivo(s) para solucionar o problema proposto, e a organização, porque é necessária a planificação/ordenação da sequência dos processos cognitivos para que os resultados desejados sejam atingidos. Ainda conforme a Autora citada, os estudantes com desempenho efetivo no processo de ensino e aprendizagem, possuem aptidões para adquirir, organizar e utilizar o conhecimento, assim conseqüentemente, desenvolvem habilidades para a autorregulação do mesmo. Com este aprimoramento o discente torna-se responsável por sua forma de estudar, visto que ele conhece quais os meios que potencializa o alcance dos objetivos de sua aprendizagem.

Segundo Valente *et al.* (1989 apud RIBEIRO, 2003), a metacognição está presente na comunicação e compreensão oral, resolução de problemas, entre outras situações em que o conhecimento do processo de aprendizagem seja reconhecido e avaliado pelo próprio estudante. Ou seja, que envolva procedimentos que proporcionem o conhecimento do trajeto percorrido na construção do saber pelo próprio indivíduo.

Conforme Da Veiga Simão e Frison (2013) a autorregulação da aprendizagem é um processo cíclico, onde as suas diversas fases se repetem, e também multidimensional por proporcionar um papel ativo e diferenciado do sujeito diante da situação vivenciada. Portanto, é resultado da interação de variáveis pessoais, tais como: conhecimentos, competências e motivações, que lhe proporcionam oportunidade para agir, de forma estratégica, diante dos diversos contextos formativos. Sendo assim, a concepção destas Autoras acerca deste procedimento diz respeito a um processo contínuo, por estar em constante avanço, e individual, por utilizar de fatores pessoais que auxiliam a monitoração dos processos cognitivos.

O modelo de monitorização universal dos processos cognitivos, que pode ser utilizado tanto pelo docente como pelo discente no processo de ensino e aprendizagem, proposto por Flavell (1979, tradução nossa), tem como premissa os aspectos que estão assinalados e definidos no Quadro 3, a seguir:

Quadro 3 - Aspectos da monitorização cognitiva.

Aspectos	Definições
Conhecimento metacognitivo	Consiste, principalmente, em conhecimento formal ou de senso comum sobre quais fatores ou variáveis atuam e interagem afetando o curso e o resultado dos processos cognitivos.
Experiências metacognitivas	São momentos vivenciados que diante de um aumento de complexidade podem ser ignorados ou superados. Estas experiências podem ocorrer em qualquer etapa do processo cognitivo.
Objetivos (ou tarefas)	São responsáveis por impulsionar e manter os processos cognitivos ativos no sujeito.
Ações (ou estratégias)	Estratégias utilizadas para avaliar e maximizar o progresso cognitivo.

Fonte: Adaptado de Flavell (1979, tradução nossa).

Com esses aspectos destacados no quadro acima, é possível comentar algumas relações existentes entre eles. O conhecimento dos fatores ou variáveis que

afetam o curso e o resultado dos processos cognitivos, visto que a consciência destes aspectos é o que permite o agir diante das experiências metacognitivas (FLAVELL, 1987, tradução nossa). Já os objetivos e ações estão vinculados, devido que o primeiro mantém ativos os processos cognitivos e o segundo maximiza (ou otimiza) e avalia o progresso destes. Então, fica perceptível através desses dois últimos aspectos, que existe uma relação intrínseca entre a cognição e a metacognição.

Com base nas considerações de Ribeiro (2003) pode-se inferir que o processo metacognitivo na aprendizagem deve ser visto como um procedimento constantemente incentivado pelo docente, acarretando o desenvolvimento da capacidade de autorregulação no discente, e conseqüentemente possibilitando uma participação ativa do mesmo no seu processo de ensino e aprendizagem. Portanto, está autorregulação é motivada em grande parte pelos professores que mediam as situações durante o processo de ensino e aprendizagem, e tornam o estudante reflexivo neste processo.

De acordo com Paris e Winograd (1990, apud RIBEIRO, 2003), na aprendizagem a metacognição envolve dois conceitos: a *avaliação de recursos*, correspondente às “reflexões pessoais sobre o estado dos conhecimentos e competências cognitivas” (p. 114); E *metacognição em ação* que são “as reflexões pessoais sobre a organização e planificação da ação” (p. 114). Relacionando as colocações destes Autores aos aspectos da monitorização cognitiva, apresentados no Quadro 3, supõe-se que a primeira definição envolve a ponderação das capacidades cognitivas do indivíduo, correspondente ao conhecimento metacognitivo, enquanto que na segunda ocorre um processo de reflexão da ação, podendo ser baseada nas experiências metacognitivas do sujeito.

Assim, com o uso de metodologias de ensino baseadas em processos metacognitivos, além de tornar o discente ativo, como já mencionado no texto, também proporciona autonomia no seu processo de aprendizagem, regulando seus processos cognitivos, conforme suas habilidades mais desenvolvidas e que possibilitem melhores resultados na sua construção intelectual.

Concluindo, tem-se que a importância fundamental da cognição e metacognição nos processos de ensino e aprendizagem é proporcionar desenvolvimento na capacidade intelectual do indivíduo que os utiliza. Relacionando estas duas categorias com a aprendizagem de conceitos pode-se colocar que ao conhecer, sendo este um processo cognitivo, tanto a definição quanto a ocorrência do

fenômeno, o discente pode se utilizar de monitoração e autorregulação, correspondentes a tipos de processos metacognitivos, para então alcançar o conhecimento adequado e correto acerca do conteúdo estudado, considerando o seu nível cognitivo. Esta sequência de processos pode ser realizada conduzindo os estudantes a um nível de conhecimento mais aprofundado da ciência Química, como no caso do modelo conceitual da ligação de hidrogênio.

3.4 CONCEITUAÇÃO DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO SEGUNDO PUBLICAÇÕES CIENTÍFICAS E REFERENCIAIS BIBLIOGRÁFICOS DA QUÍMICA INORGÂNICA.

Com o passar dos tempos alguns conceitos químicos são inovados, diante das novas descobertas, obtidas com os avanços científicos e tecnológicos. Estes avanços estão intrinsicamente relacionados e decorrem do caráter inacabado e refutável do conhecimento científico como destacado no texto seguinte:

O conhecimento científico, como modelo do real, tem a característica de um permanente devir, um vir a ser, que o torna sempre inacabado, incompleto, pois há sempre a possibilidade de uma análise mais recente do mesmo objeto sob um novo e ainda inexplorado ângulo. “*Em nossa grande história de mistério não há problemas resolvidos e solucionados para sempre*” (EINSTEIN E INFELD, 1976, p. 39 apud GOULART, 2005, p. 3).

Portanto, é importante levar em consideração esse permanente devir que torna o conhecimento científico, inacabado e incompleto, na perspectiva de que sempre há possibilidade de uma análise mais recente do mesmo objeto sob um novo e ainda inexplorado ângulo do conhecimento científico como será discutido neste estudo a partir da análise comparativa dos modelos conceituais da ligação de hidrogênio, um dos tipos de interação intermolecular, com um longo caminho percorrido até se chegar ao modelo conceitual atual, recomendado pela IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), elaborado com bases empíricas e teóricas.

O cientista Linus Pauling (1960, tradução nossa) discute, no capítulo 12 do livro *The Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, a natureza da ligação de hidrogênio e os seus efeitos nas propriedades físicas das substâncias afirmando tratar-se de uma interação simultânea entre um átomo de hidrogênio (H) fortemente atraído, sob certas condições, a dois outros átomos. Segundo este referencial a ligação de hidrogênio foi considerada, durante certo tempo, como resultado da formação de duas ligações

covalentes com o átomo de hidrogênio. Mas, o desenvolvimento da Teoria Quântica com o reconhecimento de que o átomo de hidrogênio, com apenas um orbital estável, não pode formar mais de uma ligação covalente além da natureza iônica da interação entre os dois átomos e o hidrogênio, foram determinantes para explicar as especificidades deste tipo de ligação considerando que:

- O átomo de hidrogênio interage com dois outros átomos com número de coordenação que não excede dois (2). Sendo o íon H^+ (próton) um cátion com raio muito pequeno e com ausência de nível eletrônico na eletrosfera tem capacidade para atrair dois ânions formando um complexo estável.
- Apenas os átomos mais eletronegativos, tais como flúor (F), oxigênio (O), nitrogênio (N) e cloro (Cl) podem formar a ligação de hidrogênio. A força da ligação aumenta proporcionalmente com o aumento da eletronegatividade destes átomos. Portanto, a habilidade dos átomos para formar a ligação de hidrogênio diminui numa extensão decrescente com os valores das suas eletronegatividades.

Linus Pauling (1960, tradução nossa) também faz referência à faixa de valores das energias das ligações de hidrogênio, compreendida entre 2 e 10 kcal/mol, interferindo em diversas propriedades físicas dos sistemas que apresentam este tipo de interação, tais como: as temperaturas elevadas de mudanças de fase e anormalidades nos valores das constantes dielétrica, como constatado nas substâncias metilamina (CH_3NH_2), amônia (NH_3), cianeto de hidrogênio (HCN), que possuem requisitos para formar a ligação de hidrogênio e cujos valores das suas constantes dielétrica são acima dos esperados pela tendência observada a partir dos valores de compostos semelhantes. Este Autor destaca ainda outras propriedades que também sofrem influência da ligação de hidrogênio, entre elas: (i) A solubilidade de líquidos orgânicos, na água e outros solventes; (ii) Os pontos de fusão e de ebulição da água (H_2O); (iii) A viscosidade dos líquidos; (iv) O segundo coeficiente virial dos gases; (v) A estrutura, clivagem e dureza dos sólidos cristalinos além dos espectros de absorção no infravermelho e da ressonância magnética nuclear dos prótons.

Pimentel e McClellan (1960 apud GRABOWSKI, 2020, tradução nossa) introduziu outra definição para a ligação de hidrogênio que segundo estes Autores ocorre quando um grupo funcional (A – H) interage com um átomo (ou um grupo de átomos) B, na mesma molécula ou em moléculas diferentes, com evidência da

formação de ligação (associação ou quelação) envolvendo, especificamente a interação entre o átomo de hidrogênio do grupo (A – H) e o átomo B, representada através da estrutura (A – H ... B) na qual o átomo de hidrogênio se acha inserido entre os dois centros, A e B. O grupo funcional (A – H) é frequentemente identificado como um doador de prótons e o átomo B aceitador de prótons, assim, as denominações ácido e base de Lewis também são algumas vezes aplicadas, respectivamente, para as estruturas (A – H) e B.

Estes Autores salientam que os átomos A e B são, em geral, átomos eletronegativos, tais como oxigênio, nitrogênio ou flúor, no entanto consideram a ocorrência da ligação de hidrogênio envolvendo o grupo (C – H) como doador de próton, apesar da eletronegatividade relativamente baixa do átomo de carbono analisando as substâncias clorofórmio (CCl₃H), cianeto de hidrogênio (HCN), acetileno (C₂H₂) e outras espécies que desempenham o papel de ácido de Lewis nos complexos com ligações de hidrogênio com o grupo doador de prótons (C – H). Assim, Pimentel e McClellan consideraram as interações [C – H ... O] e [C – H ... N] como ligações de hidrogênio. Tais interações foram objeto de estudos posteriores, com numerosos debates e disputas sobre sua categorização como ligações de hidrogênio. Destacam ainda os complexos do tipo (A – H ... π) nos quais os sistemas π, como os aromáticos, desempenham o papel de base de Lewis na ligação de hidrogênio.

Estes Autores mencionam o quesito em relação ao caráter doador protônico do fragmento (A – H), bem evidenciado na definição de Linus Pauling (1960, tradução nossa) como sendo um cátion de raio muito pequeno, ou seja, um ácido de Lewis duro. Porém, Pauling não discute a ligação de hidrogênio no contexto do grupo (C – H), abordado por Pimentel e McClellan (1960 apud GRABOWSKI, 2020, tradução nossa), limitando a ocorrência desta interação apenas entre elementos mais eletronegativos da tabela periódica.

Anos depois, Jeffrey e Saenger (1991 apud DESIRAJU, 2011, tradução nossa) questionaram se a interação (C – H ... O = C) poderia ser considerada ligação de hidrogênio, levando em conta a eletronegatividade baixa do átomo de carbono (C), ligado ao átomo de hidrogênio (H), e a pequena diferença de eletronegatividade entre estes elementos. As definições de Linus Pauling (1960, tradução nossa) e Pimentel; McClellan (1960, tradução nossa) refuta e corrobora, respectivamente, a possibilidade desta estrutura complexa ser considerada ligação de hidrogênio. Assim, diante destas

contradições surgiu a necessidade de se estabelecer novos parâmetros conceituais para este tipo de ligação.

Nesta perspectiva definiu-se como parâmetro específico que caracteriza a ligação de hidrogênio a ocorrência de uma região com alta densidade de carga positiva centrada no átomo de hidrogênio (H) ligado covalentemente ao átomo X, de maior eletronegatividade que o hidrogênio. Dessa forma, na concepção elaborada por Steiner e Saenger (1993 apud DESIRAJU, 2011, tradução nossa) qualquer interação do tipo (X – H...Y) pode ser identificada como ligação de hidrogênio desde que as densidades de cargas positiva e negativa estejam localizadas, respectivamente, no hidrogênio ($H^{\delta+}$) e no átomo ($Y^{\delta-}$), além da condição de que o elemento (X) seja mais eletronegativo que o (H). Assim, sem restringir a determinados elementos químicos como estabelecidos por Pauling (1960, tradução nossa).

No capítulo 8 do referencial bibliográfico *Concise Inorganic Chemistry* (D. LEE, 1991, p. 255, tradução nossa), a ligação de hidrogênio é explicada simplificada como “sendo uma atração eletrostática fraca entre um par de elétrons livres de um átomo e um átomo de hidrogênio ligado covalentemente e tendo uma carga parcial positiva (δ^+)”. De acordo com este referencial este tipo de ligação é formada apenas quando o átomo ligado covalentemente ao hidrogênio tem eletronegatividade elevada, pondo em destaque os quatro elementos mais eletronegativos da tabela periódica: flúor (F); oxigênio (O); nitrogênio (N) e cloro (Cl). Caracteriza-se ainda este tipo de ligação como sendo de intensidade fraca cujos valores de energia de ligação variam na faixa de 4 a 45 kJ/mol fazendo bem inferior quando comparado com o valor da energia da ligação covalente C – C, igual a 347 kJ/mol, mas, sem apresentar qualquer análise sobre os valores das energias das ligações de hidrogênio em diferentes contextos químicos. Destaca ainda a importância significativa deste tipo de ligação nos sistemas químicos e bioquímicos:

[...] Elas são extremamente importantes por serem responsáveis pela ligação das cadeias peptídicas em proteínas e por ligarem pares de bases nas gigantes moléculas contendo ácidos nucleicos. As ligações de hidrogênio mantêm essas moléculas em configurações moleculares específicas, o que é importante para o funcionamento de genes e enzimas. [...] São responsáveis pelo fato de a água ser líquida à temperatura ambiente e, se assim não fosse a vida tal como a conhecemos não seria possível. Como as ligações de hidrogênio são fracas, suas energias de ativação são baixas. Por isso exercem um papel importante em muitas reações químicas que ocorrem a temperatura ambiente (D. LEE, 1991, p. 255, tradução nossa).

Segundo Steiner (2002, apud HOUSECROFT; SHARPE, 2012, tradução nossa), uma interação representada esquematicamente pela estrutura ($X - H \cdots Y$) é classificada como ligação de hidrogênio apenas se existir uma ligação local e se o fragmento ($X - H$) atuar como doador de próton para o átomo Y. Nesta concepção trata-se a eletronegatividade do átomo X como parâmetro que define o fragmento ($X - H$) como um ácido de Lewis (ou seja, receptor do par de elétron) enquanto que o átomo Y (ou grupo de átomos), neste contexto de ligação, atua como uma base de Lewis (ou seja, doador do par de elétrons). Esse caráter da ligação de hidrogênio entre um hidrogênio protônico, ou seja, um ácido de Lewis, com uma base de Lewis também foi abordado por D. Lee (1991, tradução nossa).

Segundo o referencial bibliográfico *Inorganic Chemistry* (SHRIVER; ATKINS, 2010, tradução nossa) a ligação de hidrogênio é reconhecida como um átomo de H entre dois átomos de elementos mais eletronegativos e classificados como não metálicos. Estes autores destacam que a possibilidade de ocorrência desta ligação está condicionada a presença simultânea de átomos altamente eletronegativos (citando: F, O, N) e pares isolados em compostos ricos em elétrons. Diante destas considerações ressalta a maior polaridade da ligação covalente ($E - H$) formada entre um elemento eletronegativo (E) e o hidrogênio (H). Assim, o átomo de H, com carga parcial positiva ($\delta^-E - \delta^+H$) pode interagir com um par de elétrons isolado de um composto rico em elétrons.

Estes Autores também fazem uma análise comparativa das energias das ligações de hidrogênio, em diferentes ambientes químicos, com as energias das ligações covalentes convencionais evidenciando que, em geral, as ligações de hidrogênio são mais fracas que as ligações convencionais como destacado nos valores apresentados na Tabela 2 abaixo:

Tabela 2 - Entalpia das ligações de hidrogênio e ligações covalentes com os respectivos elementos químicos (kJ/mol).

Interação	Energia (Ligação de Hidrogênio)	Interação	Energia Ligação covalente
HS-H \cdots SH ₂	7	S-H	363
H ₂ N-H \cdots NH ₃	17	N-H	386
HO-H \cdots OH ₂	22	O-H	464
F-H \cdots FH	29	F-H	574
HO-H \cdots Cl	55	Cl-H	428
F-H \cdots F	163		

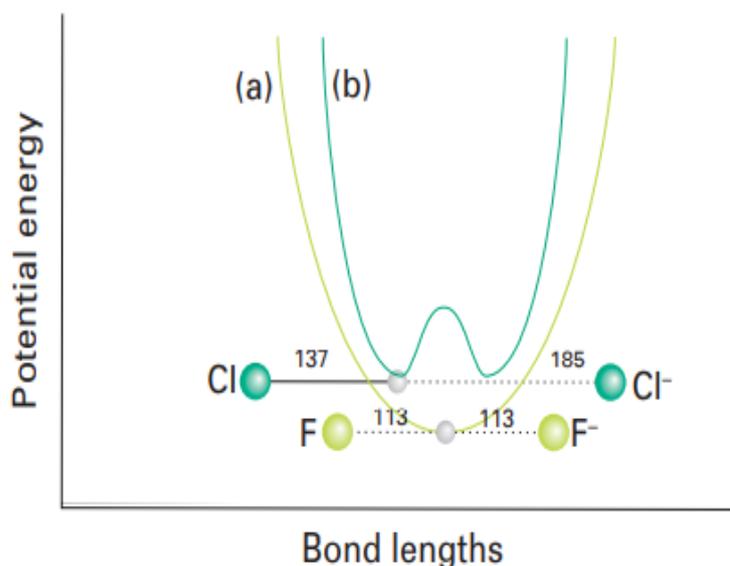
Fonte: Reprodução de SHRIVER; ATKINS (2010, p. 285, tradução nossa).

Os dados mostram que os valores das energias das ligações de hidrogênio são bem inferiores aos valores das energias das ligações covalente formada entre os átomos correspondentes, como exemplificado para a ligação de hidrogênio ($\text{HS} - \text{H} \cdots \text{SH}_2$) com energia de ligação de 7 kJ/mol bem inferior a energia da ligação covalente ($\text{S} - \text{H}$), igual a 363 kJ/mol, caracterizando a primeira interação como comparativamente mais fraca. Observa-se também que os valores das energias das ligações de hidrogênio aumentam com a maior diferença de eletronegatividade do fragmento ($E - \text{H}$). Por exemplo, na interação $\text{HS} - \text{H} \cdots \text{SH}_2$ o enxofre, no fragmento ($\text{S} - \text{H}$), possui valor de eletronegatividade na escala de Pauling igual a 2,58; enquanto que na interação $\text{F} - \text{H} \cdots \text{FH}$ o flúor, no fragmento ($\text{F} - \text{H}$), possui valor de eletronegatividade na escala de Pauling igual a 3,98 contribuindo para as diferenças nas energias destas ligações de hidrogênio, iguais, respectivamente, a 7 kJ/mol e 29 kJ/mol.

Analisando os dois últimos complexos da Tabela 2 – $\text{HO} - \text{H} \cdots \text{Cl}^-$ e $\text{F} - \text{H} \cdots \text{F}^-$ – nos quais os receptores de prótons são bases de Lewis portadores de cargas negativas verifica-se que entre os complexos destacados são os que apresentam valores mais elevados da ligação de hidrogênio, principalmente no caso do complexo ($\text{F} - \text{H} \cdots \text{F}^-$) cuja energia correspondente (163 kJ/mol) reflete a maior intensidade deste tipo de interação. Neste caso, deve-se considerar a alta eletronegatividade do átomo de flúor (F), já mencionada, e o seu menor tamanho comparado aos outros elementos químicos.

Este referencial discute ainda as tipologias das ligações de hidrogênio quanto ao arranjo estrutural do átomo de hidrogênio entre os dois núcleos no complexo formado. Na ligação de hidrogênio assimétrica o átomo de H não está na posição intermediária entre os dois núcleos envolvidos na interação, diferentemente do que ocorre na ligação de hidrogênio simétrica. Cita-se como exemplo a estrutura linear assimétrica do íon $[\text{ClHCl}]^-$ na qual o átomo de hidrogênio (H) não está igualmente centralizado entre os núcleos de cloro (Cl). Diferentemente da estrutura do íon bifluoreto, $[\text{FHF}]^-$ na qual o átomo de H está em posição intermediária entre os dois átomos de flúor (F). Estas diferenças estruturais, nos complexos simétricos e assimétricos, resulta na variação das energias potenciais destas estruturas. Na Figura 4 tem-se uma reprodução do gráfico com a variação da energia potencial (*potential energy*) com a posição do próton entre os dois átomos numa ligação de hidrogênio:

Figura 4 - Energia potencial e disposição do átomo de H entre os dois átomos nos íons (a) $[\text{FHF}]^-$ e (b) $[\text{ClHCl}]^-$.

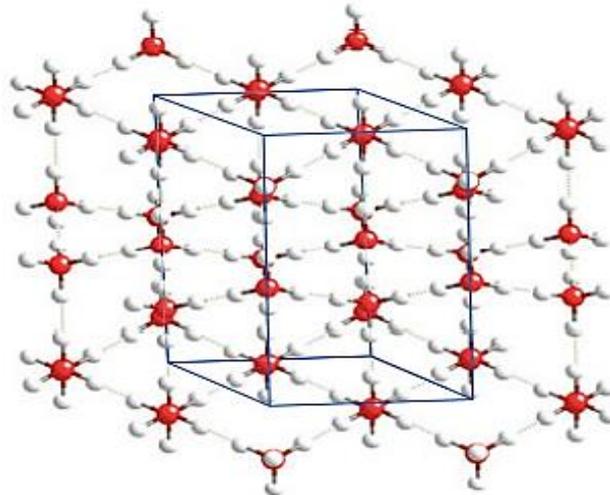


Fonte: SHRIVER; ATKINS (2010, p. 285), reprodução sem tradução.

Na Figura 4 é possível identificar as diferenças estruturais das ligações de hidrogênio assimétrica e simétrica e suas implicações nas energias potencial dos complexos formados. Na ligação de hidrogênio do íon $[\text{ClHCl}]^-$ as distâncias entre o átomo de hidrogênio e os dois átomos de cloro são diferentes e iguais à 137 pm e 185 pm. Logo, o átomo de hidrogênio não se localiza no meio da distância internuclear entre os dois átomos de cloro caracterizando-a, assim, como assimétrica. No entanto, na ligação de hidrogênio do íon $[\text{FHF}]^-$, o H está localizado no meio da distância internuclear entre os dois átomos de flúor e com a distância da separação entre os dois núcleos (226 pm) sendo significativamente menor do que a soma dos raios de van der Waals de cada átomo de flúor isolado (2×135 pm).

Este referencial bibliográfico também discute como a presença da ligação de hidrogênio interfere nas propriedades estruturais dos sólidos com as interações entre as moléculas, definindo a forma de empacotamento, como exemplificado pela estrutura do gelo e do HF sólido. A disposição da orientação desta ligação consegue determinar a organização das moléculas no empacotamento do estado sólido, correspondentes as suas estruturas cristalinas. Segundo os Autores uma das manifestações mais interessante da ligação de hidrogênio é a estrutura do gelo, especialmente a estrutura comum a baixa pressão (gelo-1) que cristaliza numa célula unitária hexagonal com cada átomo de oxigênio rodeado tetraedricamente por outros quatro átomos, como representado esquematicamente na Figura 5, a seguir:

Figura 5 - Estrutura cristalina do gelo.



Fonte: SHRIVER; ATKINS (2010, p. 285).

Nesta estrutura os átomos de O (em vermelho) são mantidos unidos, em grande parte, por ligações de hidrogênio do tipo $O-H\cdots O$ e $O\cdots H-O$ distribuídas pelo sólido. Devido a esta organização, numa estrutura cristalina bastante aberta, a densidade do gelo é menor que a da água. A densidade é uma propriedade física que define a relação entre a massa e o volume de uma dada espécie de matéria de forma que a densidade e o volume se relacionam de forma inversamente proporcional. Assim, o espaçamento maior das moléculas de água na estrutura cristalina do gelo implicará na densidade menor nesta conformação no estado sólido.

Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) destacam ainda que a ligação de hidrogênio desempenha um papel importante na determinação das estruturas das proteínas e ácidos nucleicos. As ligações de hidrogênio específicas entre adenina e timina e entre guanina e citosina são a base de replicação do DNA.

Relacionando as discussões teóricas sobre a ligação de hidrogênio apresentadas nos dois referenciais bibliográficos – D. Lee (1991, tradução nossa), Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) – observa-se nas duas abordagens sobre este modelo de ligação foi apresentada uma análise comparativa das energias das ligações de hidrogênio e ligações covalentes, porém Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) aborda com mais detalhes essa analogia, incluindo nessa perspectiva a eletronegatividade dos elementos envolvidos no complexo. No entanto, D. Lee (1991), diferentemente de Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) não discute a influência da localização simétrica ou assimétrica do hidrogênio entre os dois núcleos no complexo formado nem as energias das interações em diferentes contextos químicos. Assim,

houve algumas evoluções em relação a abordagem científica desta interação intermolecular com relação ao arranjo simétrico ou assimétrico do átomo de hidrogênio no complexo que caracteriza a ligação de hidrogênio. Logo, este tópico, presente apenas no referencial de Shriver; Atkins (2010, tradução nossa), é bastante importante, pois contribui para compreender a dimensão da ligação de hidrogênio, sem restringi-la a conceitos superficiais.

De acordo o referencial bibliográfico *Inorganic Chemistry* (HOUSECROFT; SHARPE, 2012, p. 309, tradução nossa), a ligação de hidrogênio “é formada entre um átomo de H ligado a um átomo eletronegativo e um átomo eletronegativo que possui um par isolado de elétrons” como representado pela estrutura: $(X - H \cdots Y)$, na qual o átomo (Y) pode, ou não, ser igual ao átomo (X) mas pondo em destaque que, neste contexto de ligação, não é necessário que o átomo (X) seja altamente eletronegativo para que possa haver uma interação significativa na ligação de hidrogênio.

Housecroft e Sharpe (2012, p. 309, tradução nossa) se referem as tipologias mais comuns da ligação de hidrogênio destacando os complexos: $(F - H \cdots F)$; $(O - H \cdots F)$; $(O - H \cdots O)$; $(N - H \cdots O)$; $(O - H \cdots N)$; $(N - H \cdots N)$ mas observam que no contexto científico atual já está bem reconhecida a ocorrência de “ligações de hidrogênio mais fracas, em particular a interação $(C - H \cdots O)$, que desempenha um papel importante nas estruturas de estado sólido de moléculas pequenas e nos sistemas biológicos”. Ainda de acordo com estes Autores (p. 309, tradução nossa) a ampla variedade de interações atualmente classificadas como ligações de hidrogênio implica que a definição desta ligação no contexto científico atual não deve ser tão restritiva afirmando que o “termo ligação de hidrogênio cobre uma ampla gama de interações com uma variedade correspondente em forças de interação”.

Destacam também que numa interação típica $(X - H \cdots Y)$ a ligação covalente $(X - H)$ é ligeiramente mais longa e mais fraca que a ligação comparável quando na ausência da ligação de hidrogênio. Nesta representação, considera-se que há uma interação eletrostática entre um hidrogênio (H) da ligação covalente, com carga parcial positiva (δ^+), e um par isolado de elétrons de um átomo adjacente. No entanto, algumas observações experimentais não podem ser explicadas com um modelo puramente eletrostático apontando na direção de uma contribuição covalente cuja importância aumenta à medida que a ligação de hidrogênio se torna mais forte.

A Tabela 3 apresenta diferentes categorias de ligações de hidrogênio quanto a simetria, a representação do complexo e a entalpia da dissociação correspondente de cada tipo de interação obtida através de cálculos para as espécies em fase gasosa (HOUSECROFT E SHARPE, 2012, p. 310, tradução nossa):

Tabela 3 – Valores típicos para a entalpia de dissociação da ligação de diferentes tipos de ligações de hidrogênio. Sendo calculados para as espécies em fase gasosa.

Categoria da ligação de hidrogênio	Ligação de hidrogênio (···)	Entalpia de dissociação (kJ.mol⁻¹)
Simétrica	F···H···F em [HF ₂] ⁻	163
Simétrica	O···H···O em [H ₅ O ₂] ⁺	138
Simétrica	N···H···N em [N ₂ H ₇] ⁺	100
Simétrica	O···H···O em [H ₃ O ₂] ⁻	96
Assimétrica	N–H···O em [NH ₄] ⁺ ···OH ₂	80
Assimétrica	O–H···Cl em OH ₂ ···Cl ⁻	56
Assimétrica	O–H···O em OH ₂ ···OH ₂	20
Assimétrica	S–H···S em SH ₂ ···SH ₂	5
Assimétrica	C–H···O em HC≡CH···OH ₂	9
Assimétrica	C–H···O em CH ₄ ···OH ₂	1 a 3

Fonte: Adaptação de HOUSECROFT e SHARPE (2012, p. 310, tradução nossa).

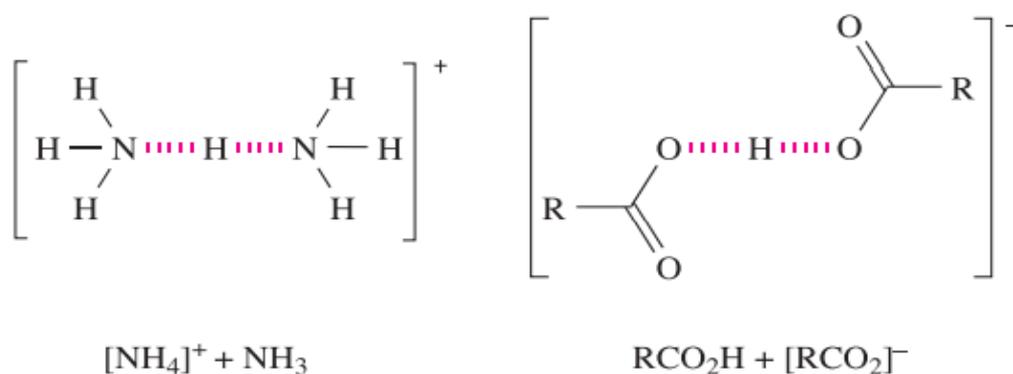
Os dados apresentados na Tabela acima foram calculados para as espécies em fase gasosa, contudo são valores de entalpias aproximados quando aplicados a ligações de hidrogênio entre moléculas numa rede no estado sólido. Através da ordem de apresentação dos dados é possível identificar que essas ligações simétricas, possuem os maiores valores de entalpias de dissociação, em relação as assimétricas, e esta entalpia aumenta com o aumento da eletronegatividade do elemento que está interagindo com o átomo de H.

Nos complexos de ligação de hidrogênio assimétricos, destacados na Tabela 3, a variação da entalpia de dissociação da ligação de hidrogênio é bastante variada. Entretanto, nos dois últimos complexos, C–H···O em HC≡CH···OH₂ e C–H···O em CH₄···OH₂, é nítido uma diferença mesmo envolvendo os mesmos elementos químicos, C, H e O. O primeiro complexo analisado possui maior energia de dissociação da interação, correspondendo a 9 kJ.mol⁻¹, enquanto o segundo varia entre 1 a 3 kJ.mol⁻¹, e a distinção destes dois complexos é a presença da ligação tripla (≡) no primeiro, entre os átomos de carbono, assim acarretando uma maior entalpia de dissociação da ligação de hidrogênio. Essa sobreposição de valores de entalpia ocorre devido a ligação (≡) representar um sistema π, denso de elétrons, consequentemente isso proporciona uma maior deficiência de elétrons no átomo H,

que se relaciona de forma direta com a entalpia de dissociação, ou seja, quanto maior a ausência de elétrons no átomo de H maior será a energia de dissociação da ligação de hidrogênio.

Housecroft e Sharpe (2012, tradução nossa) destaca as ligações de hidrogênio simétricas, como o caso do complexo iônico $[\text{HF}_2]^-$, apresentado na Tabela 3, onde o átomo de H encontra-se no meio da ligação dos dois átomos de F num complexo com carga negativa, com um alongamento considerável da ligação covalente H–F original, para formar duas interações $\text{H}\cdots\text{F}$ equivalentes. De acordo com estes Autores, a ligação de hidrogênio simétrica ($\text{X}\cdots\text{H}\cdots\text{X}$) é melhor considerada em termos de uma interação de 3 centros e 2 elétrons (3c-2e). No complexo ($\text{F}\cdots\text{H}\cdots\text{F}$) cada ligação $\text{H}\cdots\text{F}$ é relativamente forte, com entalpia de dissociação (163 kJ/mol) semelhante a energia de dissociação da ligação F – F na molécula F_2 (158 kJ/mol) mas bem inferior a entalpia de dissociação da ligação H–F (570 kJ/mol). Geralmente ocorrem ligações de hidrogênio fortes e simétricas com caráter covalente entre átomos iguais. Exemplos comuns envolvem interações entre um ácido e sua base conjugada em que não há distinção entre os átomos doadores (X) e receptores (Y). Algumas destas estruturas simétricas estão representadas Figura 6, a seguir:

Figura 6 - Organização da ligação de hidrogênio simétrica entre o íon $[\text{NH}_4]^+$ com NH_3 e as moléculas de ácido carboxílico com o respectivo ânion.



Fonte: Housecroft e Sharpe (2012, p. 312).

Housecroft e Sharpe (2012, p. 312, tradução nossa) observa ainda que no contexto científico atual já é um consenso de que o termo ligação de hidrogênio cobre uma ampla gama de interações com variação correspondente das respectivas forças de interação com as entalpias de dissociação variando na faixa de 1 a 163 kJ/mol. Portanto o uso de descritores qualitativos “forte”; “moderada” (ou “normal”); “fraca” são

comuns para as ligações de hidrogênio, dependendo do contexto químico em que ocorrem estas interações.

Os Autores também abordam a capacidade da ligação de produzir estruturas de redes no estado sólido, como no caso do gelo e mencionam a importância da ligação de hidrogênio nos sistemas biológicos, como no caso da formação helicoidal dupla do ácido desoxirribonucleico (DNA), combinando os pares das bases nitrogenadas.

Comparando os pontos colocados por (SHRIVER; ATKINS, 2010, tradução nossa) com os de (HOUSECROFT; SHARPE, 2012, tradução nossa), tem-se que os contextos de simetria, formação de estruturas cristalinas no estado sólido e a importância em sistemas biológicos, acerca da ligação de hidrogênio são apresentados nos dois referenciais. Entretanto, apenas o segundo referencial menciona a relação existente entre o comprimento maior da ligação covalente (X–H) quando ocorre a formação da ligação de hidrogênio sendo, portanto, mais fraca quando comparada com a mesma estrutura de ligação na ausência desta interação.

A recomendação recente da Comissão Internacional da Química Pura e Aplicada, IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), define a ligação de hidrogênio como uma interação atrativa entre um átomo de hidrogênio – de uma molécula ou um fragmento molecular (X – H) em que X é mais eletronegativo que H – e um átomo, ou um grupo de átomos, na mesma ou em outra molécula diferente, em que há evidência de formação de ligação. Portanto, uma ligação de hidrogênio típica pode ser representada esquematicamente através da seguinte estrutura:



Nesta representação os três pontos (...) denotam a ligação entre um fragmento doador (X – H) e um aceitador (Y – Z) de próton, na ligação de hidrogênio. O fragmento aceitador pode ser: um átomo ou um ânion (Y⁻), ou um fragmento ou uma molécula (Y – Z) em que o átomo Y está ligado covalentemente ao átomo Z. Em alguns casos, X e Y são átomos de um mesmo elemento químico e também as distâncias (X – H) e (Y – H) são as mesmas, resultando em ligações de hidrogênio simétricas. Em qualquer caso, o fragmento aceitador é uma região rica em elétrons, mas, que não se limita apenas a pares de elétrons isolados de átomos ou sistemas π.

Desiraju (2011, tradução nossa), um dos membros da comissão que elaborou esta publicação da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), complementa esta definição descrevendo a ligação de hidrogênio como uma interação complexa e que envolve, pelo menos, os seguintes aspectos físico-químicos: (i) Natureza eletrostática (ácido/base de Lewis). (ii) Polarização (dureza/moleza) – o termo “duro” se aplica às espécies químicas naturalmente pequenas, com densidade de carga elevada e dificilmente polarizáveis. O termo “mole” se aplica às espécies químicas que são naturalmente grandes, possuem densidade de carga baixa e são facilmente polarizáveis. (iii) Van der Waals (dispersão/repulsão). (iv) Covalência (transferência de carga).

Nesta estrutura complexa, representada na Equação 1, os fragmentos: (X – H); (H ... Y); (Y – Z) afetam e são afetados uns pelos outros. Sendo assim, considera ser equivocada, apesar de comum, a ideia de que apenas o fragmento (H...Y) constitui a ligação de hidrogênio. Destaca ainda que a ligação de hidrogênio não se caracteriza como uma ligação covalente muito fraca, uma interação de Van der Waals muito forte, ou um tipo de interação dipolo-dipolo direcional e particularmente forte.

Conforme a recomendação da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) a formação da ligação de hidrogênio pode ser ratificada por evidências tanto experimentais quanto teóricas, ou idealmente, pela combinação das duas. Além disso foram relacionados, nesta publicação, os critérios que devem nortear a caracterização desta ligação num dado contexto químico. Apesar de não serem necessariamente exclusivos, quanto maior o número de critérios satisfeitos, mais confiável é a caracterização de uma dada interação como sendo ligação de hidrogênio.

No Quadro 4, a seguir com tradução nossa, estão apresentados todos os critérios formulados por este referencial com as considerações pertinentes a cada um deles:

Quadro 4 - Critérios da ligação de hidrogênio proposto pela IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa).

Critérios	Considerações
<p>(C1): As forças envolvidas na formação de uma ligação de hidrogênio incluem aquelas que são: (i) De origem eletrostática. (ii) Decorrentes da transferência de carga entre o doador e o aceitador levando a uma ligação covalente parcial. (iii) Oriundas da dispersão.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Segundo a IUPAC, quando uma interação é devida, principalmente, às forças dispersivas, ela não pode ser caracterizada como uma ligação de hidrogênio. Essa situação ocorre nas interações do tipo Aromáticos...CH₄ e CH₄...CH₄ (ARUNAN <i>et al.</i>, 2011, tradução nossa). ▪ Nem todos os grupos (X–H) que apontam para um átomo qualquer Y constitui uma ligação de hidrogênio (DESIRAJU, 2011).
<p>(C2): Os átomos X e H estão ligados covalentemente um ao outro e esta ligação X–H é polarizada. A força da ligação H...Y cresce com o aumento da eletronegatividade do átomo X.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ A IUPAC destaca que a eletronegatividade dos elementos pode mudar dependendo do ambiente químico em que se encontra, pode-se citar como exemplo os organometálicos e outros sistemas altamente polarizáveis. Contudo, recomenda-se que nenhum sistema em que o H não possua a carga parcial positiva na interação X–H...Y seja considerada uma ligação de hidrogênio (ARUNAN <i>et al.</i>, 2011). ▪ Desiraju (2011) considera que este critério é uma condição praticamente obrigatória, pois para que ocorra uma interação entre a densidade de elétrons do aceitador com o fragmento doador, o átomo de H deve ser deficiente de elétrons, com relação ao átomo X.
<p>(C3): O ângulo da ligação X–H...Y é geralmente linear (180°) e quanto mais próximo deste ângulo for o arranjo dos átomos nesta estrutura menor a distância da ligação H...Y e mais forte a ligação de hidrogênio.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Segundo a IUPAC os ângulos da ligação de hidrogênio (X–H...Y) tendem para 180° sendo preferencialmente maiores que 110°, como no caso do dímero de fluoreto de hidrogênio [(HF₂)₂] quase linear. Em relação a distância H...Y, a soma dos raios de Van der Waals dos átomos H e Y são historicamente encontrados como sendo menores do que o somatório destes raios individuais, e esse encurtamento da distância foi tomado como um indicador infalível da ligação de hidrogênio, entretanto isso é verdadeiro apenas para as ligações fortes. Mesmo sendo frequente essa diminuição no comprimento da ligação, esse paradigma não é recomendado, pois deve-se notar que as distâncias experimentais são medias vibracionais e difeririam de distâncias calculadas a partir da minimização de energia potencial (ARUNAN <i>et al.</i>, 2011). ▪ Para Desiraju (2011) este critério adequa-se a fenômenos similares da ligação de hidrogênio que podem ocorrer com átomos muito pequenos (Li, Be) e com átomo polarizáveis (ligação de halogênios).

Quadro 4 - Critérios da ligação de hidrogênio proposto pela IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa).

Critérios	Considerações
<p>(C4): O comprimento da ligação covalente X–H normalmente aumenta com a formação da ligação de hidrogênio, ocasionando um deslocamento para frequências menores e um aumento da seção transversal de absorção do infravermelho para a vibração do estiramento 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 com a formação da ligação H...Y são gerados.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ A IUPAC afirma que geralmente o comprimento da ligação X–H aumenta e há um deslocamento vermelho associado a frequência de alongamento de X–H. Mas, é possível a diminuição do comprimento, assim observando-se um deslocamento azul na frequência de estiramento da ligação analisada. Porém, também é possível a existência da ligação de hidrogênio sem estas alterações. Na ligação Y–Z, ocorre um afastamento do comprimento em comparação com esta ligação isolada. As frequências vibracionais e as intensidades da banda espectral, em relação a Y–Z, também demonstram alterações correspondentes a formação da ligação em estudo (ARUNAN <i>et al.</i>, 2011).
<p>(C5): A ligação de hidrogênio X–H...Y–Z leva a picos característicos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) incluindo a desblindagem pronunciada de próton para H em X–H, através de acoplamentos de spin-spin entre X e Y, e aprimoramentos nucleares de Overhauser.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Pode-se declarar, de acordo com o ponto abordado neste critério ao lado, que o RMN indica através de picos característicos uma desblindagem do átomo de H ocasionada pela ligação X–H.
<p>(C6): A energia de formação de Gibbs para a ligação de hidrogênio deve ser maior do que a energia térmica do sistema para que a ligação de hidrogênio seja detectada experimentalmente.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Nesse critério a IUPAC (ARUNAN <i>et al.</i>, 2011, tradução nossa) destaca uma relação entre a energia de formação de Gibbs e a energia térmica da ligação de hidrogênio para análises experimentais. Mas para que esta ligação tenha significado prático, ela deve ser termicamente estável. Considerando isto, um complexo de ligação de hidrogênio pode ser produzido num feixe supersônico ou numa matriz criogênica, porém pode não ser encontrado na mistura de temperatura ambiente das duas moléculas. ▪ Sobre esta abordagem Desiraju (2011, tradução nossa) afirma que está lidando-se com as ligações de hidrogênio de intensidade muito fraca, e que estão na energia limitante. Estas ligações são definidas na habilidade de alguém as detectar, sendo uma função da temperatura de medição.

Fonte: Adaptado de IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) e Desiraju (2011, tradução nossa).

Os pontos adicionados pelo referencial da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) merecem atenção em sua análise, visto que durante a discussão abordada acima, existem exceções que devem ser consideradas e investigadas individualmente. Neste Trabalho de Conclusão de Curso o conceito da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) irá embasar a análise e discussão sobre as interpretações construídas pelos discentes ao longo da sua formação docente.

4 METODOLOGIA

Nesta seção será discutido todo o percurso metodológico deste trabalho de forma a atingir o objetivo determinado nesta pesquisa. Assim, nos subtópicos seguintes é apresentado detalhadamente os aspectos da metodologia definidos para este TCC.

4.1 A TIPOLOGIA DO ESTUDO

Trata-se de uma pesquisa básica, de abordagem qualitativa e com finalidade exploratória objetivando compreender como os discentes de um Curso de licenciatura em Química no Agreste de Pernambuco interpretam o modelo conceitual da ligação de hidrogênio na perspectiva do seu estado da arte atual tendo como procedimento metodológico o estudo de caso.

Classifica-se como: (i) Básica por não conter em sua estrutura aplicações práticas e gerar novos conhecimentos nas áreas em investigação. (ii) Qualitativa, pois envolve a análise das interpretações conceituais apresentadas pelos sujeitos de pesquisa. (iii) Exploratória, de acordo com seus objetivos, pois não há na literatura tantas informações de estudos acerca do conceito da ligação de hidrogênio, então ocorrerá uma aproximação com o assunto insuficientemente pesquisado. (iv) Conforme os procedimentos metodológicos trata-se de um estudo de caso que compreende em coletar e analisar informações acerca de determinado grupo ou comunidade, a fim de compreender aspectos variados relacionados com o assunto da pesquisa (PRODANOV; DE FREITAS, 2013).

4.2 SUJEITO E CAMPO DA PESQUISA

O universo da pesquisa foi constituído por uma comunidade acadêmica de um curso de formação docente em Química de uma Universidade Pública no Agreste de Pernambuco. A amostra foi representativa do total dos discentes ingressantes e regularmente matriculados no primeiro e no oitavo períodos do referido Curso contabilizando um total de 20 (vinte) discentes, sendo: 10 (dez) discentes ingressantes e 10 (dez) discentes do oitavo período do Curso. Os estudantes do primeiro período foram escolhidos para representar o conhecimento dos discentes ingressantes acerca da ligação de hidrogênio, pois estes demonstram o nível de compreensão da interação construído no Ensino Médio, enquanto que os acadêmicos do oitavo período

representaram o grau de desenvolvimento dos estudantes ao longo do curso, destacando que a partir deste respectivo período até o final do curso não se abrange contribuições nos seus componentes curriculares que possam interferir nas interpretações conceituais dos discentes sobre a ligação de hidrogênio.

Os discentes ingressantes participantes foram escolhidos de forma aleatória entre aqueles que responderam ao questionário da pesquisa e estavam regularmente matriculados no primeiro período do Curso durante o semestre 2020.2 do calendário acadêmico institucional tendo como critérios de inclusão: (i) Estar regularmente matriculado no 1º período do referido Curso; (ii) Aceitar participar voluntariamente da pesquisa. Os critérios de exclusão foram: (i) Não estar matriculado no primeiro período do Curso; (ii) Não aceitar participar da pesquisa.

Os discentes do oitavo período participantes foram escolhidos de forma aleatória entre aqueles que responderam ao questionário da pesquisa e estavam regularmente matriculados nesta etapa do referido Curso e tendo como critérios de inclusão: (i) Estar regularmente matriculado no oitavo período do Curso; (ii) Aceitar participar voluntariamente da pesquisa; (iii) Possuir no seu histórico acadêmico a situação de aprovado no componente curricular de Química Inorgânica I. Os critérios de exclusão dos discentes do oitavo período foram não atender a qualquer um dos critérios de inclusão já relacionados.

Na definição da distribuição quantitativa dos discentes do Curso na composição da amostra (10 discentes do primeiro período e 10 do oitavo período) levou-se em consideração a intenção da pesquisa de identificar possíveis diferenças das interpretações conceituais em relação à ligação de hidrogênio ao longo da formação dos discentes: ingressantes e matriculados na fase final do Curso. Logo justifica-se a escolha entre a mesma quantidade de estudantes nas duas turmas selecionadas, conforme os critérios já citados anteriormente, e que indicaram as informações necessárias para a análise da pesquisa.

4.3 COLETA DE DADOS

O instrumento de coleta de dados utilizado na pesquisa foi o questionário online, contendo perguntas abertas e fechadas a respeito do conceito da ligação de hidrogênio. A escolha deste instrumento se deu considerando a necessidade de se coletar as informações necessárias sobre as opiniões dos sujeitos da pesquisa visando subsidiar a discussão sobre o objeto pesquisado, ou seja, sobre os modelos

conceituais considerados pelos discentes acerca da ligação de hidrogênio, logo este instrumento de coleta de dados é mais apropriado para tal finalidade.

4.3.1 Questionário

Segundo Gerhardt *et al.* (2009, p. 69), o questionário possui o objetivo de “levantar opiniões, crenças, sentimentos, interesses, expectativas, situações vivenciadas.”, dessa forma os estudantes poderão expor suas ideias de forma geral, a respeito do conceito em estudo. O questionário foi criado no portal da empresa JotForm sediada em São Francisco, onde no mesmo disponibiliza a criação de formulários online que auxiliam a obtenção de dados para diversas pesquisas, inclusive acadêmicas. Este criador possibilita a produção de questões com uma ampla variedade de apresentações, como seleções de diversas alternativas em determinada questão e também a elaboração de ilustrações, possibilitando ao respondente desenhar esquemas e representações sobre o tema em discussão. Este instrumento de coleta de dados é estruturado por questões abertas e fechadas, sendo que as primeiras solicitam a produção da escrita do discente acerca da ligação de hidrogênio enquanto que as segundas disponibilizam uma série de respostas predeterminadas para que o estudante selecione de acordo com o enunciado da questão, mas abordando o mesmo assunto das perguntas abertas.

A aplicação do questionário foi durante as aulas síncronas do componente curricular “Introdução à Química”, para coleta de dados dos discentes ingressantes, e “Metodologia da Pesquisa Educacional”, para os discentes do oitavo período do referido Curso. Então, durante esses momentos realizados no Google Meet, enviou-se o link do formulário, correspondente ao questionário, no chat para que os discentes acessassem e respondessem as questões formuladas conforme os seus conhecimentos atuais. Para o grupo dos discentes ingressantes, a aplicação do questionário foi realizada na primeira semana do semestre letivo de 2020.2 considerando a ausência de interferências da formação do Curso no conhecimento dos discentes do primeiro período sobre o conteúdo investigado. Enquanto que para o grupo de discentes do oitavo período a aplicação do instrumento de coleta de dados foi realizada durante a terceira semana do referido semestre, levando-se em consideração que os componentes curriculares deste respectivo período não contribuem de forma considerável acerca do aprofundamento conceitual do tema pesquisado.

A estrutura dos questionários aplicados para os discentes ingressantes e os do oitavo período era composta pelas mesmas questões, entretanto para este segundo grupo solicitava-se mais algumas informações, sendo estas: (i) o ano com seu respectivo semestre de ingresso do discente, para comprovar seu período e (ii) qual a situação no histórico escolar atual em relação ao componente curricular de “Química Inorgânica I” cuja ementa aborda o tópico “Hidrogênio” com destaque para a ligação de hidrogênio nas referenciais bibliográficos recomendados.

Os dados foram coletados pela leitura das respostas das perguntas abertas, e nas questões fechadas, pela identificação das alternativas marcadas. Os discentes ingressantes foram identificados pelo código Dix, onde x corresponde a valores inteiros de 1 à 10, e os discentes do oitavo período pelo código Dey, sendo y um número inteiro variando de 11 à 20, esta representação codificada contém a finalidade de preservar a identidade dos sujeitos da pesquisa, escolhidos aleatoriamente em cada grupo.

4.4 ANÁLISES DE DADOS

A análise dos dados obtidos nos questionários foi realizada de acordo com a análise de conteúdo, que se inicia de acordo com Gerhardt *et al.* (2009, p. 84), “pela leitura das falas, realizada por meio das transcrições de entrevistas, depoimentos e documentos.”. Com isso, os resultados foram examinados por uma avaliação das respostas formuladas pelos sujeitos da pesquisa no instrumento de coleta de dados.

Na fase seguinte, segundo Caregnato e Mutti (2006), ocorrerá a exploração dos dados, sendo estes codificados a partir das unidades de registro identificadas nos questionários, especificamente nas questões abertas, e também uma análise do avanço que foi identificado entre a compreensão do conceito da ligação de hidrogênio dos discentes do primeiro período com os do oitavo período do referido Curso.

Conforme as mesmas Autoras, a última etapa consiste na categorização, que utiliza de comparações para classificação, direcionando para a formação de grupos com aspectos semelhantes. Estes sendo definidos de acordo com a aproximação das interpretações conceituais, a respeito da ligação de hidrogênio, dos discentes e tendo como base de análise o referencial da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa).

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este trabalho tem como objetivo analisar as interpretações conceituais dos discentes acerca da ligação de hidrogênio adquiridos no decorrer do processo formativo dos mesmos num Curso de Licenciatura em Química no Agreste de Pernambuco, considerando o primeiro e oitavo período. Assim, os dados foram coletados a partir de um questionário semiestruturado que foi aplicado aos discentes ingressantes, regularmente matriculados no primeiro período do semestre acadêmico 2020.2, e aos discentes que se encontram na etapa final dessa formação, mais precisamente no oitavo período do referido Curso, destacando que a partir desta fase os componentes curriculares não contribuem de forma considerável com a interpretação conceitual dos discentes sobre a interação. Nesta perspectiva de estudo levou-se em consideração que o percurso formativo dos discentes resultou no conhecimento dos aspectos conceituais da ligação de hidrogênio, no contexto científico atual, que devem ser destacados no processo de ensino e aprendizagem a nível superior do profissional químico.

Toda a análise das interpretações conceituais dos discentes sobre a ligação de hidrogênio, construídas durante a sua formação, foi embasada na definição recomendada pela IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) que descreve todos os aspectos atômicos e estruturais específicos desta interação atrativa entre fragmentos doador e aceitador de próton na mesma molécula ou em moléculas diferentes.

Inicialmente foi indagado aos estudantes participantes do estudo se os mesmos **“Conheciam o tipo de interação que ocorre predominantemente entre as moléculas da água nos estados sólido e líquido”**. Obtendo-se que oito (08) discentes ingressantes responderam “SIM” e dois (02) “NÃO”, correspondendo, respectivamente, a 80% e 20% do total deste grupo de discentes, demonstrando que as interações moleculares nos estados sólido e líquido foram abordadas no percurso formativo dos mesmos no Ensino Básico. Entre os discentes do oitavo período, nove (09) responderam “SIM” e um (01) respondeu “NÃO”, representando 90% e 10%, respectivamente. Sendo assim, a maioria destes estudantes, em diferentes contextos formativos, expressaram ter conhecimento do tipo de interação dominante no sistema determinado na questão, sinalizando a possibilidade da capacidade de contextualização da interação nos diversos meios em que a mesma se faz presente e

do aprofundamento do conhecimento sobre este modelo de ligação no referido Curso. Este resultado é relevante para analisar as alterações nas interpretações conceituais sobre a ligação de hidrogênio destes dois grupos de estudantes neste Curso de formação docente em Química.

No sentido de aprofundar a análise sobre o nível de conhecimento dos graduandos envolvidos na pesquisa sobre a interação predominante entre as moléculas de água foi solicitado que os mesmos explicitassem **“Qual o tipo de interação predominante entre as moléculas desta substância nos estados sólido e líquido”**. As respostas dos discentes, ingressantes e do oitavo período, estão sistematizadas no Quadro 5 a seguir. Salienta-se que os discursos apresentados neste quadro com fonte em itálico correspondem às transcrições diretas das respostas elaboradas por estes discentes no instrumento de coleta de dados sendo preservada a identidade dos mesmos:

Quadro 5 – Respostas dos discentes identificando a interação predominante entre as moléculas de água.

Discentes Ingressantes (Di)		Discentes do Oitavo período (De)	
Discentes	Respostas	Discentes	Respostas
Di3; Di5; Di9	Mencionaram a ligação de hidrogênio.	De12; De13; De14; De16; De20	Mencionaram a ligação de hidrogênio.
Di1; Di4; Di7; Di10	<i>“Interações intermoleculares”</i> .	De11; De15	<i>“Interações de hidrogênio”</i> .
Di6	<i>“Duas ligações de hidrogênio e uma de oxigênio”</i> .	De19	<i>“Interação de Van Der Waals”</i> .
Di8	<i>“Apolare”</i> .	De17	<i>“Força intermolecular”</i> .
Di2	Não sabe responder.	De18	Não sabe responder.

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

O pesquisador considerou como correta as respostas dos discentes participantes deste estudo afirmando ser a “ligação de hidrogênio” a interação predominante entre as moléculas de água nos estados líquido e sólido baseando-se nos referenciais bibliográficos da Química Inorgânica destacados no embasamento teórico deste TCC. Como destacado por Desiraju (2011, tradução nossa) as moléculas de água interagem, nos estados sólidos e líquidos, através da ligação de hidrogênio, proporcionando as propriedades características e necessárias desta substância para o desenvolvimento da vida no nosso planeta. As respostas consideradas como parcialmente corretas correspondem aquelas que citaram “as interações moleculares” de forma genérica considerando que esta denominação se refere tanto a ligação de

hidrogênio como também a outros tipos de interações. Por fim, as respostas incorretas não correspondem a nenhuma das classificações anteriores.

Verifica-se a partir das respostas sistematizadas no Quadro 5 que apenas três (03) discentes ingressantes citaram a ligação de hidrogênio enquanto sete (07) dos discentes do oitavo período responderam corretamente a este questionamento indicando ter conhecimento de que a ligação de hidrogênio é a interação predominante entre as moléculas da água nos estados sólido e líquido. Este resultado é condizente com o conhecimento previsto para um graduando na etapa final de um curso de formação docente em Química, considerando a importância da água no contexto teórico e experimental desta Ciência, até mesmo na realização das reações químicas mais básicas, com esta interação influenciando algumas propriedades importantes desta substância química. Também foram consideradas corretas as respostas dos discentes De11 e De15 citando as “*Interações de hidrogênio*”. Nesta análise avaliativa considerou-se que estes discentes usaram esta denominação se referindo às ligações de hidrogênio entre as moléculas de água, pois esta ligação trata-se de uma interação intermolecular envolvendo o átomo de H. Além disso, entre as categorias das interações intermoleculares que são abordadas nos referenciais bibliográficos na graduação em Química se inclui a ligação de hidrogênio.

No conjunto de respostas destacadas no Quadro 5, foram consideradas como parcialmente corretas as respostas dos discentes ingressantes Di1, Di4, Di7 e Di10 referindo-se às “*Interações intermoleculares*” mesmo tratando-se de uma resposta abrangente sem pontuar as especificidades deste tipo de interação intermolecular. Nesta avaliação levou-se em consideração que esta terminologia cobre uma gama de interações, tais como: dipolo permanente-dipolo permanente, dipolo permanente-dipolo induzido e dipolo induzido-dipolo induzido, incluindo a ligação de hidrogênio.

Segundo a IUPAC (2014, p. 265, tradução nossa) o termo “intermolecular é descritivo de qualquer processo que envolve a transferência de átomos, grupos de átomos, elétrons etc. ou interações entre duas ou mais entidades moleculares”, como no caso da ligação de hidrogênio. Ou seja, as entidades químicas representativas das substâncias moleculares (as moléculas) interagem através de forças (atrativas e repulsivas) sem que ocorram alterações nas ligações químicas que as estruturam. Também é importante salientar que, de acordo com a recomendação da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), a ligação de hidrogênio não é apenas

intermolecular, pois pode ocorrer inclusive entre átomos ou grupo de átomos na mesma molécula.

Esta resposta parcialmente correta destes discentes ingressantes pode ser decorrente das dificuldades para identificar e diferenciar os diversos tipos de interações intermoleculares que podem ocorrer e competir num dado sistema químico, pois essa ação exige aprofundamento conceitual sobre as especificidades das ligações que estruturam as moléculas e das geometrias moleculares. Como ressaltado por Seribeli (2019) essas dificuldades tem sido discutidas na literatura e relacionam-se com os problemas na compreensão dos estudantes sobre as correlações entre a estrutura molecular, a polaridade das ligações primárias, a polaridade da molécula e as mudanças físicas das substâncias que são influenciadas pelo tipo de interação intermolecular predominante num dado sistema.

Nesta mesma perspectiva de análise a resposta do discente De19, do oitavo período, citando à “*Interação de Van Der Waals*” também foi considerada como parcialmente correta, pois a ligação de hidrogênio se inclui em uma das suas classes de interações. Portanto, trata-se de uma classificação genérica que se refere às forças (atrativas ou repulsivas) entre as moléculas ou diferentes partes dela, excluindo-se as ligações covalentes (LIMA, 2014). Sendo assim, o estudante apresenta uma visão limitada sobre as especificidades das moléculas da água e da ligação de hidrogênio que é predominante entre elas se referindo, de forma abrangente, às interações de Van Der Waals. Nesta mesma concepção a resposta do discente De17, se referindo à “*Força intermolecular*”, também foi considerada como sendo parcialmente correta, visto que as expressões utilizadas por estes dois discentes do oitavo período correspondem à mesma gama de interações como já detalhado anteriormente ao se analisar as respostas dos discentes ingressantes referindo-se às “*Interações intermoleculares*”.

Entre as respostas dos discentes ingressantes consideradas incorretas destacam-se as seguintes interpretações e comentários pertinentes:

- Di6 referindo-se à “*Dois ligações de hidrogênio e uma de oxigênio*”. Esta construção textual sinaliza que este discente confunde as ligações primárias entre os átomos de hidrogênio (H) e oxigênio (O) que estruturam as moléculas da substância química água (H_2O). No entanto, a ligação de hidrogênio que é predominante entre as moléculas de água nos estados sólido e líquido é intermolecular e não intramolecular. Dessa forma ficou evidenciada a

dificuldade deste discente em diferenciar as ligações primárias das ligações intermoleculares.

- Di8 afirmando que a ligação predominante é “*Apolar*” e demonstrando desconhecer a polaridade das ligações primárias entre os átomos de oxigênio e hidrogênio (O – H) na molécula da água e a geometria angular desta molécula que lhe confere um momento de dipolo resultante da ordem de 1,855 D. O termo apolar, segundo Housecroft e Sharpe (2012, tradução nossa), se refere a uma distribuição simétrica de elétrons numa ligação diatômica homonuclear, portanto sem formação de dipolo elétrico, diferentemente do que ocorre na ligação O – H. Conforme Steiner e Saenger (1993 apud DESIRAJU, 2011, tradução nossa), a ligação de hidrogênio pode ser identificada desde que as densidades de cargas, positivas e negativas, estejam localizadas, respectivamente, nos átomos hidrogênio ($H^{\delta+}$), ligado covalentemente a um átomo genérico e mais eletronegativo, e no átomo ($Y^{\delta-}$), logo caracterizando a formação de dipolo.

Verificou-se ainda que nos dois grupos de discentes, ingressantes e do oitavo período, apenas um em cada grupo (Di2 e De18) afirmaram desconhecer o tipo de interação predominante entre as moléculas de água nos estados sólido e líquido. Este resultado para um discente do oitavo período é inadequado considerando que se encontra no estágio final da formação docente em Química, no referido Curso. Então, relacionando com o Ensino Superior, Junqueira (2017) afirma que mesmo sendo composto por diversos componentes curriculares que abordam a ligação de hidrogênio e outras interações, a dificuldade na compreensão aprofundada, interdisciplinar e contextualizada nos níveis microscópicos e macroscópicos, pode ser ocasionada pela fragmentação curricular deste nível de ensino.

Mas, tendo como premissa que a ligação de hidrogênio foi abordada no referido curso em diferentes componentes curriculares, pode-se inferir que o discente De18 durante o seu percurso formativo na Graduação não utilizou dos recursos cognitivos, como: interpretar, classificar, memorizar, hipotetizar, entre outros, pois conforme Nascimento (2009) a presença destes processos cognitivos torna o sujeito crítico e protagonista do seu processo de ensino e aprendizagem, possibilitando-o, assim, desenvolver o conhecimento acerca de determinado conteúdo. Também é possível deduzir a ausência de situações que proporcionam a metacognição, como:

comunicação e compreensão oral, e resolução de problemas, visto que de acordo com Valente *et al.* (1989 apud RIBEIRO, 2003) essas atividades podem proporcionar conhecimento do processo de aprendizagem e a sua avaliação pelo próprio estudante, possibilitando a ação de autorregulação para potencializar o processo.

Além dos dados do estudo referentes a esta questão observa-se que os discentes ingressantes e do oitavo período não fizeram referência à interação dipolo permanente-dipolo permanente que ocorre entre moléculas polares, ou seja, moléculas com momento de dipolo resultante (HOUSECROFT E SHARPE, 2012, tradução nossa) como no caso específico das moléculas de água, logo poderia ser vista como uma resposta coerente com o sistema determinado em análise, considerando que a polaridade das ligações e a estrutura molecular são conteúdos importantes que permeiam as discussões nos componentes curriculares na formação docente em Química bem como no Ensino Básico desta Ciência.

Na sequência do instrumento de coleta de dados foi solicitado aos estudantes participantes que **“Formulassem, de acordo com seus entendimentos, uma definição para o tipo de interação predominante entre as moléculas da água, nos estados sólido e líquido”**. A análise das respostas elaboradas pelos estudantes para esta pergunta foi embasada na recomendação da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) que define a ligação de hidrogênio como sendo uma interação atrativa entre um átomo de hidrogênio – de uma molécula ou de um fragmento molecular (X – H) sendo X um átomo mais eletronegativo que o H – e um átomo, ou um grupo de átomos, na mesma ou em outra molécula, em que há evidência de formação de ligação. A representação esquemática desta ligação, conforme já descrito na Equação 1 ($X - H \cdots Y - Z$) evidencia a interação entre dois fragmentos que são denominados, respectivamente de doador (X – H) e aceitador (Y – Z) de prótons. Este referencial destaca ainda que o fragmento aceitador de próton consiste em uma região rica em elétrons, sem se limitar apenas aos pares de elétrons isolados ou elétrons π .

Dessa forma, foram analisadas como “corretas” as respostas dos discentes que mencionaram, nos seus discursos, todos os seguintes aspectos, que estão destacados na definição recomendada pela IUPAC, e considerados relevantes na perspectiva deste estudo: (i) *Interação atrativa*; (ii) *Ligação covalente (X–H) com o elemento X sendo mais eletronegativo que o hidrogênio*; (iii) *Evidência da formação*

de ligação; (iv) Interação do átomo de H com o fragmento aceitador de próton. Já as respostas dos estudantes que mencionaram apenas três dos aspectos anteriores foram consideradas “parcialmente corretas”, ou que continham os aspectos (ii) e (iv) simultaneamente no discurso, pois estes compreendem aos pontos principais de compreensão de formação da interação. Por fim, foram consideradas “incorretas”, as respostas dos estudantes cujo discurso não apresentou nenhuma relação com a definição da IUPAC, adotada como modelo neste estudo, ou não abordaram a quantidade mínima destes aspectos definida para as respostas consideradas como parcialmente corretas.

A partir da análise das respostas, formuladas pelos discentes ingressantes para esta pergunta, é possível concluir que nenhum deles foi capaz de conceituar a ligação de hidrogênio abordando todos os destaques conceituais da IUPAC, levados em consideração neste estudo. As respostas foram genéricas se referindo às características da interação classificando-a como “*atrativa*” (Di3), associando-a à atração eletrostática entre “*um polo positivo [...] e um polo negativo*” (Di5), caracterizando-a como uma “*ligação polar e apolar*” (Di8), contextualizando sua importância influenciando os estados físicos da água “*sem as ligações de hidrogênio a água não teria seu estado líquido ou sólido, pois seria só um gás*” (Di6), considerando-a como “*uma ligação muito forte devido a diferença nos estados em que a água se encontra*” (Di9), ou indicando-a como “*uma ligação que disponibiliza equilíbrio entre as moléculas*” (Di1) e “*responsável pelas diferentes fases da matéria*” (Di7).

Um ponto importante do discurso do estudante Di9 é que além de contextualizar a ligação de hidrogênio no âmbito das mudanças de fase da água, o mesmo ainda a classificou como uma ligação “*muito forte*”. Essa colocação é coerente com a ideia discutida por Seribeli (2019), em relação a forma como os docentes do Ensino Básico abordam a questão energética destas interações descrevendo a ligação de hidrogênio como sendo o tipo de interação intermolecular que apresenta valores de entalpia de ligação mais elevados, sem considerar os diversos contextos químicos nesta estrutura – ou seja, as características químicas dos fragmentos doador e aceitador de próton e suas especificidades – que se refletem em diferentes graus de intensidade desta ligação. Algumas das respostas elaboradas pelos discentes ingressantes foram consideradas bastante incoerentes referindo-se às “*reações entre os átomos*” (Di4) e às “*moléculas dos compostos formados por ligações covalentes*” (Di10), pois

divergem da ideia conceitual desta ligação. Neste grupo de discentes apenas um (Di2) afirmou não saber conceituar a ligação de hidrogênio. Este mesmo discente também não conseguiu indicar, na questão anterior, qual o tipo de interação predominante entre as moléculas de água nos estados sólido e líquido.

Então, de acordo com esses discursos superficiais e classificados na categoria incorreta, pode-se inferir a ausência de processos cognitivos na aprendizagem do conceito da ligação de hidrogênio, visto que os mesmos possibilitam a construção do conhecimento. Inclusive, Bigge (1977 apud NASCIMENTO, 2009) destaca a memorização, compreensão e reflexão como os processos responsáveis pelo desenvolvimento do pensamento crítico e reflexivo do indivíduo. Dessa forma, ficou evidente que estes recursos cognitivos citados pelo Autor não estiveram presentes na construção do conhecimento destes discentes acerca da interação, em estudo, visto que não demonstraram memorização, compreensão e nem reflexão da definição da mesma.

Portanto, conclui-se através das respostas elaboradas pelos discentes ingressantes para esta pergunta que não ocorreu aprofundamento conceitual sobre a ligação de hidrogênio durante a formação destes estudantes no Ensino Básico, visto que a maioria dos discursos destes discentes não apresentou a quantidade mínima dos aspectos contidos no conceito da IUPAC como definido anteriormente na análise desta questão. Apenas dois estudantes deste grupo, Di3 e Di5, abordaram a característica atrativa da interação, mas sem qualquer discussão adicional, e também sem mencionar outros aspectos importantes que caracterizam esta ligação.

Por outro lado, observou-se que os discentes do oitavo período abordaram nas suas interpretações conceituais diversos pontos importantes que caracterizam a ligação de hidrogênio. No entanto, apenas o discente De13 incluiu na formulação da sua resposta todos os aspectos destacados na definição IUPAC, cuja transcrição está apresentada no Quadro 6, a seguir:

Quadro 6 – Resposta correta do discente do oitavo período conceituando a ligação de hidrogênio.

Discentes	Respostas
De13	<i>“Quando uma molécula possui na sua estrutura átomos de hidrogênio ligados a um átomo mais eletronegativo, por exemplo o oxigênio, esse átomo mais eletronegativo irá deixar o hidrogênio deficiente de elétrons. Essa deficiência permite que o hidrogênio faça interações com pares de elétrons livres de outros átomos, caracterizando-se como uma ligação de hidrogênio”.</i>

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

No discurso deste discente é possível identificar todos os aspectos destacados no conceito da IUPAC e que foram considerados relevantes na análise das respostas construídas pelos estudantes para esta pergunta. Nessa construção textual o discente De13 se refere: (i) À ligação covalente do hidrogênio (H) com outro elemento mais eletronegativo como o oxigênio. (ii) À interação atrativa entre o H “deficiente de elétrons” (com caráter ácido, observação do pesquisador) com pares de elétrons livres de outro átomo (fragmento aceitador de próton, observação do pesquisador), caracterizando a formação de ligação. Entretanto, o discente De13 restringe o fragmento aceitador de próton a pares de elétrons livres.

Esse tipo de limitação, caracterizando a presença de pares de elétrons livres no fragmento aceitador do complexo da ligação de hidrogênio também é observado nos seguintes referenciais da Química Inorgânica indicados na bibliografia principal do referido Curso: (i) D. Lee (1991, p. 255, tradução nossa) que explica simplificadaamente a ligação de hidrogênio como “sendo uma atração eletrostática fraca entre um par de elétrons livres de um átomo e um átomo de hidrogênio ligado covalentemente e tendo uma carga parcial positiva (δ^+)”. (ii) Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) ao mencionar que a possibilidade de ocorrência da ligação de hidrogênio está condicionada a presença de átomos altamente eletronegativos (como F, N e O) e pares isolados em compostos ricos em elétrons. Porém, de acordo com a IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) o fragmento aceitador é uma região rica em elétrons, mas não se limita apenas a pares de elétrons isolados ou a sistemas com elétrons π .

De forma geral, o discente De13 demonstra possuir compreensão aprofundada sobre a ligação de hidrogênio, visto que descreve os diversos aspectos importantes da interação. Então, com esse conhecimento acerca da ligação, demonstra-se que o estudante utilizou do processo de extração e captação da informação. Segundo Fonseca (2009) estes dois procedimentos, compreende ao que se pode denominar como cognição e utiliza-se da capacidade de processar a informação, integra-la e exprimi-la caracterizando a apropriação do conhecimento.

No entanto, outros discentes do oitavo período abordaram nas suas respostas apenas três dos aspectos selecionados pelo pesquisador que caracterizam a ligação de hidrogênio que são: (i) Aspecto atrativo. (ii) A ligação covalente do H com outro átomo mais eletronegativo que o mesmo. (iii) Indicação de formação de ligação.

Assim, estas respostas transcritas no Quadro 7 a seguir, foram avaliadas como sendo parcialmente corretas:

Quadro 7 – Respostas parcialmente corretas dos discentes do oitavo período conceituando a ligação de hidrogênio.

Discentes	Respostas
De11	▪ <i>“Tipo de força intermolecular que ocorre entre dipolos permanentes das moléculas de água, em que o polo positivo é sempre o hidrogênio, e o polo negativo do oxigênio, atraindo-se fortemente gerando um tipo ligação”.</i>
De12	▪ <i>“Tipo de interação de Van der Waals que ocorre quando o hidrogênio está ligado a uma espécie muito eletronegativa. Quando isto acontece, o átomo de H fica tão deficiente de elétrons que acaba tornando-se um polo muito positivo na molécula. Essa carga positiva é tão forte que permite a interação molecular, em questão, possuir um caráter de ligação, porém não deixa de ser uma interação intermolecular”.</i>
De16	▪ <i>“A ligação de hidrogênio, fazendo parte das forças intermoleculares é considerada uma das mais forte. Trata-se de uma ligação de um átomo hidrogênio (carga parcial positiva) de uma molécula com um átomo eletronegativo, especificamente, o oxigênio (carga parcial negativa) de uma outra molécula. Ou seja, é uma rede complexa de interações entre átomos de moléculas”.</i>

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

A análise textual das respostas dos discentes De11, De12 e De16 permite identificar que praticamente todos os termos da definição da IUPAC determinados para classificação de resposta correta estavam presentes, porém sem descrever com clareza, ou mesmo sem descrever, a interação entre o átomo de hidrogênio com caráter ácido e o fragmento aceitador de próton, que no caso da ligação de hidrogênio entre moléculas de água são os átomos de oxigênio ricos em elétrons. Os estudantes De11 e De16 classificaram a ligação de hidrogênio como um tipo de força intermolecular, e o De12 a identificou como uma interação de Van Der Waals, ambas denominações correspondem aos mesmos tipos de interações intermoleculares.

No entanto Lima, L. S. (2014) considera a ligação de hidrogênio como sendo um caso particular das interações intermoleculares (ou forças) de Van Der Waals denominadas de Forças de Keesom (ou seja, interações entre dipolo permanente – dipolo permanente). Este tipo de interação ocorre entre moléculas polares, dada a existência de zonas tanto com excesso como deficiência de densidade eletrônica. Assim, a interação entre moléculas polares dá-se por atração eletrostática da parte positiva do dipolo de uma molécula com a parte negativa do dipolo de outra molécula. No caso da molécula de água as regiões com deficiência e excesso de densidade eletrônica são, respectivamente, os átomos de hidrogênio e oxigênio. Ao estabelecer que a ligação de hidrogênio é um caso particular da interação entre dipolos

permanentes, este Autor evidencia que outros critérios devem ser analisados na caracterização desta interação.

Aprofundando a análise do discurso dos discentes De11 e De16, além de caracterizá-la como um tipo de força intermolecular, estes graduandos também generalizam a ligação de hidrogênio como sendo uma das mais fortes entre as demais interações, sem considerar as especificidades químicas dos fragmentos doador e aceitador de prótons que definem fatores estruturais e de simetria desta ligação. Nesta perspectiva Housecroft e Sharpe (2012, p. 312, tradução nossa) destaca que no contexto científico atual, o uso dos descritores qualitativos “forte”, “moderada” (ou “normal”) e “fraca” vai depender do ambiente químico da ligação, mais especificamente das propriedades atômicas dos elementos que constituem os fragmentos doadores e aceitadores de prótons além de fatores geométricos.

Segundo Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) as ligações de hidrogênio podem ser simétricas ou assimétricas dependendo do arranjo estrutural do átomo de hidrogênio entre os dois núcleos no complexo formado. Na ligação de hidrogênio simétrica o átomo de H encontra-se na posição intermediária entre os dois núcleos envolvidos na interação, diferentemente do que ocorre na assimétrica. Também abordando as geometrias das ligações de hidrogênio, Housecroft e Sharpe (2012, tradução nossa) destaca que as ligações simétricas, fortes e com certo caráter covalente ocorrem entre átomos iguais, apresentando, nestes casos, valores elevados de energia de dissociação da interação. Sob outra perspectiva, a IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) menciona no critério (C3) que as ligações de hidrogênio mais fortes contêm o ângulo da ligação geralmente linear (180°) ou próximo deste valor. Então, de acordo com esses fatores geométricos citados é possível observar a diversidade de intensidades que a ligação, em estudo, está inserida.

Analisando as respostas dos discentes do oitavo período que apresentaram discursos classificados na categoria parcialmente correta, tem-se que na perspectiva dos processos metacognitivos, a autorregulação foi realizada de forma correta, porém um dos aspectos de análise da definição da ligação de hidrogênio ficaram ausentes. Então, pode-se inferir que durante o processo autorregulador realizado pelos estudantes um ou mais de um dos processos cognitivos não foram realizados corretamente, pois de acordo com Ribeiro (2003) a autorregulação capacita o estudante a escolher o(s) melhor(es) processo(s) cognitivos para solucionar uma

situação problema e também organiza-lo(s), que no caso dessa questão corresponde a aprendizagem do conceito da ligação de hidrogênio.

As demais respostas dos graduandos se enquadram na categoria incorreta, consistindo em discursos que não possuem qualquer coerência com a definição recomendada pela IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), ou não abordaram, no mínimo, três dos quatro critérios destacados nesta definição para que as elaborações conceituais destes discentes pudessem ser consideradas neste nível de avaliação. No Quadro 8, a seguir, estão transcritas as respostas dos discentes De14; De15; De17; De19; De20 consideradas incorretas:

Quadro 8 – Respostas incorretas dos discentes do oitavo período conceituando a ligação de hidrogênio.

Discentes	Respostas
De14	▪ <i>“Interação que ocorre entre o par de elétrons livres de um átomo, numa dada molécula de um elemento químico mais eletronegativo e um outro átomo mais eletropositivo de uma outra molécula”.</i>
De15	▪ <i>“Ligações entre átomos de hidrogênio”.</i>
De17	▪ <i>“Uma força intermolecular forte, porque há uma diferença de eletronegatividade dos elementos envolvidos”.</i>
De19	▪ <i>“É uma interação intermolecular que ocorre entre moléculas de H₂O”.</i>
De20	▪ <i>“As estruturas da água na sua fase condensada (sólidos e líquido) interagem umas com as outras e tratando-se de moléculas polares, ocorre uma interação entre elas. Porém, a água não interage como a maioria das moléculas polares, pois contem em sua estrutura oxigênio e hidrogênio, assim possuindo a capacidade de formar ligação de hidrogênio uma com as outras. Sendo da seguinte forma: um átomo de O ligado a 2 átomos de H, se liga a mais 2 átomos de H de outras duas moléculas”.</i>

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

No discurso do discente De14, apesar de conter alguns dos elementos básicos conceituais da ligação de hidrogênio, mais especificamente a interação atrativa e a evidência de formação de ligação, referenciados na definição da IUPAC que norteia esta análise e discussão, o mesmo não restringe o átomo mais eletropositivo na interação como sendo o H, assim demonstrando omissão deste aspecto importante e necessário no contexto desta ligação. Este discente além de não se referir ao caráter ácido do hidrogênio também não explica essa eletropositividade em função da ligação covalente do hidrogênio com um átomo mais eletronegativo que caracteriza a formação de dipolo ($H^{\delta+}-X^{\delta-}$) no fragmento doador de próton. Na sua interpretação De14 limita-se a destacar a maior eletronegatividade do elemento químico que interage com o átomo “*mais eletropositivo*”, sem definir claramente os fragmentos

doador e aceitador de próton nesta interação, possibilitando uma compreensão bastante confusa para o pesquisador.

O discente, De15, também apresenta um discurso equivocado e incoerente, visto que aborda de forma sucinta e sem definir nenhum dos aspectos selecionados para caracterizar a ligação de hidrogênio de acordo com o conceito da IUPAC.

No seu discurso o discente De17 se refere à ligação de hidrogênio como uma força intermolecular forte devido à diferença de eletronegatividade dos elementos envolvidos na interação, mas sem fazer referência à estrutura do complexo que a caracteriza e que inclui a interação entre os fragmentos doador e aceitador de próton e suas especificidades químicas. O mesmo também designa a ligação de hidrogênio como uma “*força intermolecular forte*”. Observa-se, a partir dos dados deste estudo, que se trata de uma compreensão bastante comum entre os discentes do oitavo período participantes desta pesquisa. Como já discutido anteriormente no referencial teórico que fundamenta este estudo existem ligações de hidrogênio com intensidades das interações variadas com energias diversificadas (HOUSECROFT; SHARPE, 2012, tradução nossa). Assim não se recomenda mais a sua caracterização generalizada como “*forte*”.

Por sua vez, os estudantes De19 e De20 também se referem à ligação de hidrogênio como uma interação que ocorre entre as moléculas de H₂O, ou seja, atribuindo a capacidade da interação em um contexto, mas não menciona nenhum dos aspectos destacados na abordagem conceitual da IUPAC, já discutidos anteriormente, que foram considerados importantes para a avaliação do nível de compreensão conceitual dos estudantes pesquisados sobre esta ligação. Por fim, tem-se que um (1) discente do oitavo período (De18) afirmou não saber conceituar a ligação de hidrogênio e este mesmo estudante também não identificou a presença desta ligação entre as moléculas de água, assim demonstrando que não possui conhecimento dos contextos em que a interação se faz presente e nem da sua definição. Portanto trata-se de um resultado não esperado neste nível de formação.

Através desses discursos, classificados na categoria incorreta, pode-se deduzir que a compreensão e reflexão destes discentes, gerando a construção de hipóteses e abstração, sobre a ligação de hidrogênio não foram realizados no seu Ensino Superior, pois Nascimento (2009) afirma que através destes fatores ocorre uma contribuição para a evolução da aprendizagem do indivíduo, desenvolvimento ausente

na compreensão destes estudantes acerca do conceito da interação, foco desta pesquisa.

Para que estes estudantes, com as respostas classificadas como incorretas conceituem efetivamente a interação, é necessário conhecimento sobre a eletronegatividade dos átomos, tipo e polaridade da ligação e da estrutura molecular, características compreendidas e explicadas no nível submicro, ou seja, microscópico do conhecimento químico. Sobre este nível do conhecimento químico, Seribeli (2019) cita que as dificuldades de compreensão nestes contextos se iniciam no Ensino Básico e perpetuam-se para o Ensino Superior. Dessa forma, impossibilitando a aprendizagem de diversas interações, como a ligação de hidrogênio.

No entanto, de acordo com Raimundo, Silva e Laranjeira (2018), os discentes de um Curso de formação docente em Química compreendem a interação, em estudo, como uma ligação eletrostática entre um átomo de H e um outro átomo, sem esclarecer critérios necessários para a sua identificação. Então, comparando essa interpretação com os discursos dos discentes do oitavo período participantes desta pesquisa, se verifica um avanço praticamente parcial no conhecimento acerca da ligação de hidrogênio, uma vez que quatro (4) estudantes conseguiram abordar nas suas definições o mínimo de aspectos determinados na análise da questão, baseados no estado da arte atual da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa).

Outro ponto importante de destacar entre os discursos dos discentes do oitavo período está na ausência da determinação dos elementos que podem realizar a ligação de hidrogênio, visto que esta conduta é realizada pelo cientista Linus Pauling (1960, tradução nossa), onde o mesmo coloca que apenas os elementos mais eletronegativos, tais como F, O, N e Cl podem formar o complexo da ligação. Nesta mesma perspectiva alguns referenciais bibliográficos da Química Inorgânica, citando especificamente aqueles que estão indicados na bibliografia principal deste componente curricular do referido Curso, tais como: D. Lee (1991, tradução nossa) determinando os mesmos elementos destacados por Linus Pauling, e Shriver; Atkins (2010, tradução nossa) que menciona apenas os elementos mais eletronegativos F, O e N. Sendo assim, pode-se inferir que devido os estudantes do oitavo período não delimitarem estas restrições, os mesmos não identificam essa característica citada nos referenciais bibliográficos do Ensino Superior, apesar de que atualmente isso não se verifica no contexto da ligação.

Essa limitação dos elementos da tabela periódica capacitados a formar o complexo da ligação não se encontra no referencial padrão desta pesquisa, IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa), considerando que de acordo com o comentário do critério (C2) é condição que o elemento ligado covalentemente ao átomo de H deve possuir uma eletronegatividade maior que a do mesmo. Assim, nenhuma interação do tipo $[X-H\cdots Y]$ em que o átomo de hidrogênio não possua carga parcial positiva pode ser denominado como ligação de hidrogênio. Desiraju (2011, tradução nossa) corrobora com a informação afirmando que este critério é praticamente obrigatório, pois para que ocorra a interação do fragmento doador de próton com o fragmento aceitador (com maior densidade de elétrons) o átomo de H deve ser deficiente de elétrons com relação ao átomo X da ligação covalente formada com o hidrogênio.

A partir da análise comparativa das respostas dos discentes ingressantes e do oitavo período deste Curso de formação docente em Química consegue-se perceber que houve um avanço significativo na compreensão conceitual da ligação de hidrogênio ao longo desse processo formativo visto que estão presentes, em muitos discursos dos estudantes do oitavo período, os aspectos que caracterizam este tipo de ligação no contexto científico atual, tais como: (i) “Interação atrativa” citada nas respostas de cinco (5) discentes; (ii) “A ligação covalente polar com o átomo de H compondo a densidade de carga positiva”, nas respostas de quatro (4) discentes; (iii) “A evidência da formação de ligação”, presente nas respostas de cinco (5) discentes; (iv) “A interação do átomo de H com pares de elétrons livres” existente no discurso de dois (2) discentes. No entanto, os discursos dos discentes ingressantes indicam que os mesmos tem um conhecimento superficial ou equivocado da ligação de hidrogênio com apenas dois destes discentes fazendo referência a “interação atrativa” sem qualquer detalhamento e argumentação. Assim, estes foram os pontos de divergências identificados nos discursos dos participantes.

Finalizando esta comparação das interpretações conceituais da ligação, foco desta pesquisa, dos discentes ingressantes e do oitavo período, descreve-se como tópicos de convergência: (i) A generalização da intensidade da ligação de hidrogênio como forte, sendo que nas respostas dos discentes ingressantes esta perspectiva esteve presente na resposta de um estudante enquanto que no grupo dos discentes do oitavo período a frequência foi aumentada. (ii) A contextualização da ligação de hidrogênio, principalmente na água, porém ao contrário do ponto (i), se fez mais

presente nas respostas dos discentes ingressantes do que no segundo grupo desta pesquisa.

Dessa forma evidencia-se, a partir dos dados deste estudo, a necessidade de ampliar a discussão sobre a ligação de hidrogênio, considerando as possibilidades nos diferentes contextos formativos favorecidos pela estrutura curricular do referido Curso. Como ressaltado por Junqueira (2017) a ligação de hidrogênio é abordada, no Ensino Superior, em diferentes componentes curriculares, incluindo: Química Geral, Química Orgânica, Bioquímica, Química Analítica e Físico-Química. Mas além dos componentes curriculares citados por este Autor, destaca-se ainda, no currículo do referido Curso o componente curricular Química Inorgânica, cujos referenciais bibliográficos citados na respectiva ementa abordam, de forma direta a ligação de hidrogênio, logo a ausência de compreensão da definição desta interação deve-se estar interligada com este componente. Sendo assim, a possibilidade de abordar este tipo de interação aprofundando a compreensão dos discentes sobre seus aspectos conceituais é bastante ampla e variada, visto que são diversos componentes e estes se encontram em diversas áreas do conhecimento químico que se interrelacionam na perspectiva de um processo de ensino e aprendizagem que vise melhorar essa compreensão através da comunicação entre as diversas áreas curriculares da Química numa abordagem transdisciplinar deste conhecimento.

Também se atribui a falta de compreensão dos discentes acerca do conceito da ligação de hidrogênio aos fatores cognitivos e metacognitivos, estes decorrentes inclusive da compreensão dos conceitos da Química Geral envolvidos no contexto desta ligação. Esses processos contribuem consideravelmente na aprendizagem dos estudantes, possibilitando a apropriação de um determinado saber, como discutido anteriormente, e a reflexão sobre o mesmo.

Salientando, no período da graduação, no âmbito deste Curso, alguns aspectos devem ser mais abordados no processo de ensino e aprendizagem, como: (i) A diversidade de forças de interação que a ligação de hidrogênio possui, sendo classificadas através de descritores qualitativos como: forte, moderada e fraca, pois a maioria dos estudantes não demonstra conhecimento das ligações com intensidades moderadas e fracas; (ii) A ligação covalente do átomo de H com outro elemento mais eletronegativo, visto que a minoria dos discentes do oitavo período destacaram esse aspecto na sua definição; (iii) A interação do átomo de H com o fragmento aceitador

de próton, em razão de estar presente apenas em duas (2) respostas dos discentes deste grupo.

Contudo, também é importante destacar, no processo de ensino e aprendizagem da ligação de hidrogênio, alguns entendimentos sobre o fragmento aceitador de próton, pois os estudantes que o mencionaram nas suas interpretações conceituais limitaram este fragmento a um par de elétrons livres, mas atualmente esta região rica de elétrons neste complexo não se limita apenas à pares de elétrons livres ou sistemas π .

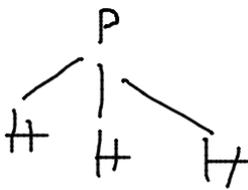
Para obter mais informação sobre o nível de compreensão dos discentes participantes do estudo sobre este complexo da ligação, foi solicitado a eles que **“Ilustrassem, de acordo com a representação de Lewis, a ocorrência da ligação de hidrogênio entre duas moléculas de amônia (NH₃) e duas moléculas de água (H₂O)”**, no instrumento de coleta de dados, possibilitando, assim, ao pesquisador conhecimento sobre como cada estudante compreende, de forma representacional, a ligação de hidrogênio.

No Quadro 9, a seguir, estão reproduzidas as representações esquemáticas elaboradas pelos discentes ingressantes descrevendo, através do nível microscópico e representacional da Química, a ligação de hidrogênio formada entre as moléculas de amônia (NH₃) e água (H₂O) conforme solicitado. Ressalta-se que nenhum destes discentes demonstrou, a partir das representações esquemáticas elaboradas nas suas respostas, conceituar de forma correta ou parcialmente correta a ligação de hidrogênio. A partir da análise das representações elaboradas pelos mesmos é possível clareza sobre os equívocos conceituais persistentes neste nível de formação sobre a ligação de hidrogênio.

Quadro 9 – Ilustrações da ligação de hidrogênio produzida pelos discentes ingressantes.

Discentes Ingressantes		
Discente	Ilustração	Comentário
Di1	$ \begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H} : \text{N} : \text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array} \qquad \text{H} - \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}} - \text{H} $	<ul style="list-style-type: none"> ▪ O estudante representa de forma isolada as estruturas de Lewis dos dois tipos de moléculas, (NH₃ e H₂O) mas sem representar a ligação de hidrogênio entre elas como solicitado. Também comete erro na representação da estrutura da Lewis da amônia com o átomo central (N) compartilhando quatro hidrogênios. Esta estrutura (NH₄¹⁺) seria do íon

		amônio, mas o discente ainda omitiu a carga do íon na representação.
Di2 (a) Di3 (b)	<p>(a) (b)</p>	<ul style="list-style-type: none"> É evidente que os discentes Di2 e Di3 interpretaram a questão elaborando a representação da ligação de hidrogênio, entre uma molécula de H_2O e outra de NH_3. Esses estudantes utilizaram da representação estrutural para reprodução dos sistemas, e tanto o Di2 como o Di3 ilustraram a ligação de hidrogênio da mesma forma que uma ligação covalente (-), sem qualquer distinção na forma específica de representar esta ligação entre duas moléculas por meio de linhas tracejadas (---). Ambos não detalham os pares de elétrons livres do átomo de nitrogênio, na estrutura molecular da amônia, e nem do oxigênio na molécula da água, correspondendo estes dois átomos ao fragmento receptor de próton em cada complexo. O Di3 desenha o átomo de O realizando três ligações, uma estando sem ligante.
Di4		<ul style="list-style-type: none"> Na representação do discente Di4 percebe-se que o mesmo compreende a ligação de hidrogênio como uma reação química entre duas moléculas, e não como uma interação intermolecular atrativa. Apesar do arranjo molecular dos átomos serem coerentes foram omitidos os pares de elétrons não ligantes nas duas estruturas de Lewis.
Di5 (c) Di10 (d)	<p>(c) (d)</p>	<ul style="list-style-type: none"> Estes dois discentes representaram as estruturas de Lewis e molecular da amônia. Apesar do arranjo dos átomos estarem coerentes nas duas estruturas foram omitidos os pares de elétrons não ligantes nas duas estruturas. Estes discentes também não representaram a ligação de hidrogênio entre duas moléculas como solicitado.
Di6		<ul style="list-style-type: none"> O discente Di6 representa apenas a estrutura de Lewis das duas moléculas sem os pares de elétrons não ligantes. Assim, o átomo central em cada estrutura (oxigênio e nitrogênio, na água e na amônia, respectivamente) não completaram

		seus respectivos octetos. Também não foi representada a ligação de hidrogênio entre as duas moléculas.
Di7		<ul style="list-style-type: none"> ▪ O discente Di7 representa a estrutura molecular da amônia de forma equivocada tendo o fósforo (P) como átomo central e não o nitrogênio (N). Não completa o octeto do átomo central e nem representa a ligação de hidrogênio entre duas moléculas de amônia.
Di8 e Di9		<ul style="list-style-type: none"> ▪ Estes discentes não representaram a interação solicitada.

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

Portanto verifica-se que o grupo dos discentes ingressantes tem algum conhecimento relativo ao modelo de repulsão dos pares de elétrons da camada de valência e da geometria molecular das moléculas destacadas nesta questão que são representativas das substâncias químicas: amônia (NH_3) e água (H_2O). As características das ligações covalentes formadas com o hidrogênio e o átomo central nestes compostos, eletronegativos e rico em elétrons, além da geometria molecular dessas moléculas (piramidal e angular respectivamente para amônia e água) caracterizam os requisitos necessários para que sejam formadas ligações de hidrogênio entre moléculas de amônia, ou de água, ou entre as moléculas das duas substâncias químicas.

Seribeli (2019) cita que uma das maiores dificuldades no Ensino Básico está centrada na identificação e representação das estruturas moleculares, porém entre os estudantes deste grupo algumas noções foram abordadas, tais como: a organização e geometria dos átomos nas moléculas, enquanto que ficou praticamente ausente a presença de pares de elétrons em todas as estruturas, sendo apontada apenas pelo discente Di1. Outra dificuldade mencionada pelo Autor está na definição da polaridade das ligações intramoleculares na estrutura e como nenhum dos discentes ingressantes apresentou os polos formados nas ligações covalentes contidas no complexo, logo se pode deduzir que este problema se encontra nitidamente entre os participantes deste grupo.

Além de não definir os polos das ligações intramoleculares, a maioria dos ingressantes não foram capazes de detalhar no âmbito representacional e microscópico da Química a ligação de hidrogênio formada entre duas moléculas de

água ou de amônia ou mesmo entre uma molécula de amônia e de água. Isso é possível pois, as moléculas de ambos os hidretos são ricas em elétrons e apresentam ligações covalentes (N – H; O – H) com o H ligados a átomos eletronegativos. Então, a compreensão da ligação de hidrogênio pelos discentes exige a discussão conceitual e representacional na dimensão microscópica da Química e precisa ser reforçada ao longo da formação docente no referido Curso.

Observa-se que a ilustração do discente Di4 representa, na linguagem representacional da Química, uma reação química entre dois reagentes (água e amônia) considerando o significado do símbolo (+) entre duas substâncias na linguagem química. Logo, este estudante interpreta a ligação de hidrogênio como sendo uma reação química entre duas substâncias e não uma interação intermolecular. Esta interpretação da representação deste estudante também está coerente com o seu discurso anterior quando define a ligação como “*reações entre os átomos*”. De acordo com Lima, S. L. (2014), a ligação de hidrogênio está inserida como um tipo particular das interações dipolo permanente-dipolo permanente, como mencionado anteriormente, e estas interações são classificadas como interações (ou forças) de Van Der Waals que compreendem as forças (repulsivas ou atrativas) entre moléculas, ou entre diferentes partes delas, excluindo as ligações covalentes. Assim, representar e definir a ligação, em estudo, como realizado pelo estudante Di4, é totalmente incoerente com a sua classificação correta.

Ainda de acordo com as representações esquemáticas dos discentes ingressantes, reproduzidas no Quadro 9, é possível verificar que metade deste discentes (Di1, Di5, Di6, Di7, Di10) apresentaram as estruturas de Lewis e/ou moleculares das moléculas representativas dos hidretos água (H₂O) e amônia (NH₃) mas sem determinar a ligação de hidrogênio entre elas. É possível fazer uma análise comparativa de algumas destas representações do Quadro 9, mais especificamente daquela elaborada pelo discente Di5, com suas respostas discursivas elaboradas nas questões anteriores sobre a ligação de hidrogênio. Neste caso este discente identificou a interação predominante entre as moléculas de H₂O nos estados sólido e líquido, como sendo as “*ligações de hidrogênio*”, mas ficou evidente que não compreende as especificidades desta interação pois não consegue elaborar corretamente a sua representação na dimensão microscópica da Química. O mesmo ocorre com o discente o Di10 ao afirmar que a interação predominante entre as moléculas de água são as “*forças intermoleculares*”, mas sem distinguir qual delas,

além de representar de forma semelhante à do discente Di5 a interação citada. Logo, conseguir identificar o tipo de interação existente entre duas moléculas nos diferentes sistemas químicos não é suficiente para os discentes tenham uma compreensão conceitual significativa sobre a mesma que permitam descreve-la corretamente na dimensão representacional e microscópica da Química.

Examinando as ilustrações desses discentes ingressantes na concepção dos processos cognitivos, verifica-se que a percepção, memorização, atenção, compreensão, linguagem e reflexão são essenciais para a apropriação do conhecimento. Inclusive, Bigge (1977 apud NASCIMENTO, 2009) destaca a memorização, compreensão e reflexão como os responsáveis pelo pensamento reflexivo dos indivíduos, porém esta reflexão se fez ausente na aprendizagem dos mesmos considerando as suas respostas construídas, pois apenas dois (02) do total deste grupo de estudantes simbolizaram a interação entre as moléculas, mas de forma equivocada. Assim, esta incompreensão pode ter sido ocasionada pela falta de reflexão sobre a representação do complexo da ligação, e também pela não realização, de forma correta, dos processos cognitivos que possibilitam a apropriação do conhecimento.

A análise e discussão das representações esquemáticas elaboradas pelos discentes do oitavo período descrevendo a ligação de hidrogênio formada entre as moléculas de amônia (NH_3) e água (H_2O) será feita na mesma sequência em que foram categorizadas as respostas formuladas por estes mesmos discentes com a definição da ligação de hidrogênio, de acordo com seus entendimentos e que foram avaliadas como corretas, parcialmente corretas e incorretas tendo como referência nesta análise o modelo conceitual da IUPAC e aspectos deste modelo que foram considerados relevantes na perspectiva deste estudo.

No Quadro 10, a seguir, está reproduzida a representação esquemática elaborada pelo único discente do oitavo período do referido curso descrevendo a ligação de hidrogênio formada entre as moléculas de amônia (NH_3) e água (H_2O) e cuja resposta formulada anteriormente apresentou uma definição da ligação de hidrogênio avaliada como correta com base no modelo conceitual da IUPAC:

Quadro 10 – Ilustração da ligação de hidrogênio produzida pelo discente do oitavo período que conceituou a ligação de hidrogênio e foi classificada na categoria “correta”.

Discentes do oitavo período		
Discente	Ilustração	Comentário
De13		<ul style="list-style-type: none"> ▪ O discente De13 além de identificar corretamente as densidades de cargas positivas e negativas nos átomos de hidrogênio e oxigênio ligados covalentemente na molécula da água (ligações primárias) também representa a interação de forma tracejada (---) entre os fragmentos doador de próton (H com caráter ácido) na molécula de água e aceitador de prótons (par de elétrons livres no nitrogênio da molécula de amônia), demonstrando a diferença entre uma ligação intramolecular e a ligação de hidrogênio. Além disso consegue representar as estruturas moleculares corretas da amônia (NH₃) e água (H₂O).

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

Sendo assim, o discente De13 conhece e compreende o modelo conceitual da ligação de hidrogênio e dessa forma elabora a sua representação de forma correta detalhando as especificidades desta interação, como a diferenciando das ligações primárias. Referenciando Johnstone¹ (2006, tradução nossa) pode-se concluir que este discente possui domínio conceitual desta interação nos níveis submicro e representacional do conhecimento químico, que exige do mesmo a compreensão das propriedades atômicas e estruturais das moléculas interagentes, tais como: eletronegatividade dos átomos, tipo e polaridade da ligação, estrutura molecular. Este aprofundamento conceitual foi evidenciado de forma expressa na sua representação, transpondo assim as dificuldades de compreensão observadas nos dois primeiros níveis representacionais do conhecimento químico.

Portanto, de acordo com esta observação torna-se evidente que este estudante se utilizou dos processos de extração e captação do conhecimento do modelo representacional da ligação de hidrogênio, pois a sua ilustração apresenta diversas

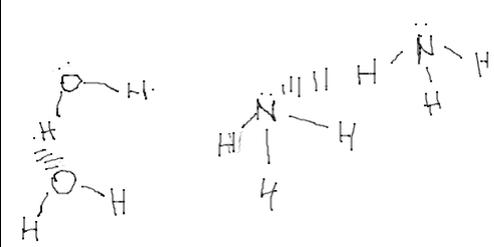
¹ O conhecimento químico possui três níveis, sendo estes: o submicro e representacional, onde aborda-se as características das entidades moleculares (eletronegatividade dos átomos, tipo e polaridades da ligação e polaridade da estrutura molecular), e o nível macro que trata das propriedades físico-químicas das substâncias e sua contextualização (JOHNSTONE, 2006, tradução nossa).

informações – representação da interação e sua distinção das ligações primárias, localização dos polos das ligações primárias e a representação dos pares de elétrons livres – que indicam a apropriação deste conhecimento. Como já discutido anteriormente, de acordo com Fonseca (2009) estes processos cognitivos (extração e captação) possibilitou a construção do conhecimento, em outras palavras, a sua acomodação caracterizando uma aprendizagem efetiva.

No Quadro 11, a seguir, estão reproduzidas as representações esquemáticas elaboradas pelos discentes do oitavo período do referido curso descrevendo a ligação de hidrogênio formada entre as moléculas de amônia (NH_3) e água (H_2O) e cujas respostas elaboradas anteriormente com a definição da ligação de hidrogênio foram consideradas como parcialmente corretas tendo como referência, nesta análise, o modelo conceitual da IUPAC e os aspectos deste modelo que foram considerados relevantes na perspectiva deste estudo:

Quadro 11 – Ilustrações da ligação de hidrogênio produzidas pelos discentes do oitavo período que conceituaram a ligação de hidrogênio e foi classificada na categoria “parcialmente correta”.

Discentes do oitavo período		
Discente	Ilustração	Comentário
De11		<ul style="list-style-type: none"> Este estudante determina os polos positivo e negativo da ligação de hidrogênio entre duas moléculas de água (polo negativo e positivo nos átomos de O e H, respectivamente). Entretanto, não representa simbolicamente a interação intermolecular entre os fragmentos doador e aceitador de próton na ligação de hidrogênio. Apesar de representar corretamente a geometria molecular angular das duas moléculas de água cada átomo de oxigênio só tem um par de elétrons livres e três átomos de hidrogênio estão representados na forma de radical com um elétron a mais além do par de elétrons da ligação.
De12		<ul style="list-style-type: none"> Esta representação do discente De12 contém aproximações entre as moléculas de água e de amônia, mas não há nenhuma representação simbólica da interação intermolecular entre os fragmentos doador e aceitador de próton na ligação de hidrogênio, apenas das correspondentes as ligações

		primárias. As estruturas moleculares das moléculas da água e de amônia estão razoavelmente corretas.
De16		<ul style="list-style-type: none"> ▪ A representação do discente De16 contém aproximações entre moléculas de água e de amônia, além da representação simbólica da interação intermolecular entre os fragmentos doador e aceitador de próton na ligação de hidrogênio com traços semelhantes aos utilizados nas ligações covalentes orientadas espacialmente em vez de linhas pontuadas. As ligações covalentes e as geometrias moleculares estão bem definidas. A quantidade de pares de elétrons livres dos átomos de nitrogênio nas moléculas de amônia está bem definida enquanto que os pares de elétrons nos átomos de oxigênios nas moléculas de água não.

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

Observa-se que representações elaboradas pelos discentes De11 e De12 não foram simbolizadas, através de linhas pontilhadas conforme a representação da IUPAC, a interação entre os fragmentos doador e aceitador de próton na ligação de hidrogênio. Nas ilustrações destes discentes observa-se apenas uma aproximação das estruturas moleculares, porém não se pode deduzir nenhuma interpretação dos estudantes somente com essa forma de representação. Esta interação do átomo de H deficiente de elétrons com o fragmento aceitador de próton (rico em elétrons) também se encontra ausente na definição da ligação de hidrogênio destes estudantes.

Já na representação elaborada pelo discente De16 a interação entre os fragmentos doador e aceitador de prótons foi desenhada de forma divergente da simbologia da linha tracejada comumente adotada para a ligação de hidrogênio. Contudo, este estudante também não mencionou na sua interpretação conceitual da ligação de hidrogênio esta interação. Dessa forma pode-se deduzir que estes discentes compreendem e representam de forma parcialmente correta o modelo conceitual da ligação de hidrogênio omitindo ainda alguns aspectos importantes para uma descrição mais detalhada desta interação.

Em relação a ilustração do discente De11, a mesma se mostra coerente com a sua interpretação conceitual da ligação de hidrogênio e está representada

esquemáticamente de forma razoavelmente correta. Este discente definiu a polarização correta do átomo de hidrogênio (H^+) na ligação covalente formada com outro elemento mais eletronegativo – o oxigênio da molécula de água (O^-) – que, portanto, é o polo negativo da interação (O^-). No entanto os discentes De12 e De16, apesar de conceituar a ligação de hidrogênio incluindo a presença da ligação covalente polarizada, não se refere nas suas representações a localização dos polos desta ligação.

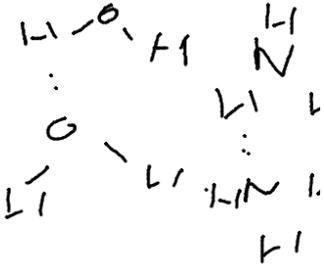
Examinando estas ilustrações na perspectiva dos níveis de conhecimento químico abordado por Johnstone (2006, tradução nossa) deduz-se que alguns saberes destes estudantes sobre a ligação de hidrogênio estão contidos em um determinado nível, porém ausente em outro. Por exemplo, as ilustrações dos discentes De11 e De12 não representam a interação entre as moléculas. Este aspecto também esteve ausente nas interpretações conceituais destes discentes. Porém, o De16 simbolizou a interação de forma parcialmente equivocada, mas não expressou na sua interpretação a interação do átomo de hidrogênio com o fragmento aceitador de próton. Dessa forma, o estudante De16 possui noções sobre o conhecimento representacional da interação entre os fragmentos, mas demonstra desconhece-la no nível submicro. Outra situação semelhante está na representação dos polos da ligação covalente com o átomo de hidrogênio, esse aspecto esteve presente em todos os discursos desses discentes (De11, De12 e De16), porém apenas De11 o considerou na sua ilustração, ou seja, somente este estudante, classificado nesta categoria, conhece este aspecto no nível submicro e representacional, enquanto os demais somente no submicro.

Na concepção dos processos cognitivos e metacognitivos, tem-se que segundo Ribeiro (2003) estes últimos interferem nos primeiros, pois através da autorregulação (processo metacognitivo) possibilita-se a organização de procedimentos cognitivos que maximizam os resultados almejados. Assim, considerando que os discentes De11, De12 e De16 ilustraram o complexo da ligação de hidrogênio com ausências de algumas informações como descrito nos comentários do Quadro 11, pode-se inferir que durante o processo de autorregulação algum dos processos cognitivos, como: adquirir, organizar, e utilizar o conhecimento, podem ter sido realizados equivocadamente, comprometendo o entendimento de alguns aspectos da interação, inclusive entre os diferentes níveis de conhecimento químico.

No Quadro 12, a seguir, estão reproduzidas as representações esquemáticas elaboradas pelos discentes do oitavo período do referido curso descrevendo a ligação de hidrogênio formada entre as moléculas de amônia (NH_3) e água (H_2O) e cujas respostas elaboradas com a definição da ligação de hidrogênio foram consideradas incorretas com base no modelo conceitual da IUPAC e seus destaque considerados relevantes na perspectiva deste estudo:

Quadro 12 – Ilustrações da ligação de hidrogênio produzidas pelos discentes do oitavo período que conceituaram a ligação de hidrogênio e foi classificada na categoria “incorreta”.

Discentes do oitavo período		
Discente	Ilustração	Comentário
De14		<ul style="list-style-type: none"> ▪ O discente De14 representou corretamente as ligações covalentes que estruturam as moléculas de amônia (NH_3) e água (H_2O) e o par de elétrons livres interagindo com o fragmento doador de próton. No entanto omite os demais pares de elétrons livres nestas moléculas. Destaca ainda a interação entre os fragmentos doador e aceitador de prótons com uma pontilhada (...) diferenciando a ligação de hidrogênio das ligações primárias.
De15		<ul style="list-style-type: none"> ▪ O graduando De15 apresenta com traço cheio (→) todas as interações (ligações primárias e ligação de hidrogênio) diferenciando-as por diferentes cores no desenho. Identificas nas duas moléculas os pares de elétrons livres dos átomos de nitrogênio e oxigênio constatando a ligação do hidrogênio com estes pares de elétrons livres.
De17		<ul style="list-style-type: none"> ▪ O discente De17 reproduz as estruturas moleculares das moléculas de água (H_2O) e de amônia (NH_3) de forma parcialmente correta sem representar os pares de elétrons livres destas moléculas. Também não representa a ligação de hidrogênio entre elas.

De19		<ul style="list-style-type: none"> ▪ O discente representa a ligação de hidrogênio no modelo pontilhado (...) entre um átomo de H na molécula da água com o oxigênio contido em outra estrutura da mesma substância, ambas apresentadas no formato planar. Porém, o estudante não inclui na ilustração os pares de elétrons livres no átomo de O. E em relação a interação entre as estruturas de amônia pouco se pode afirmar, visto que a representação dos átomos está embaraçada e as ligações primárias não estão inseridas na ilustração desse complexo, assim dificultando a compreensão do pesquisador.
------	---	--

Fonte: Dados da pesquisa, 2021.

Destaca-se entre as ilustrações apresentadas no Quadro 12 acima a forma como o estudante De14 enfatiza a ligação de hidrogênio, marcando apenas a interação entre o átomo de H e o par de elétrons livres do outro elemento químico, rico em elétrons nas interações de hidrogênio entre moléculas de água e de amônia. Contudo, Desiraju (2011, tradução nossa) afirma que a ligação de hidrogênio não se limita apenas a esta interação, apesar de ser um equívoco comum, pois todos os fragmentos que estruturam este complexo de ligação afetam e são afetados um pelos outros. Assim a forma correta representacional da ligação de hidrogênio são, respectivamente: $[N - H \cdots N - H]$ para a amônia e $[O - H \cdots O - H]$ para água. Mesmo assim sua ilustração mostrou-se bastante coerente com a interação, em estudo. No entanto, o discente De14 apresentou uma interpretação conceitual da ligação de hidrogênio bastante equivocada, visto que em nenhum trecho do seu discurso é determinada a presença do átomo de H na interação, com isso sua resposta foi classificada como incorreta. Dessa forma pode-se deduzir que o estudante possui o conhecimento representacional desta interação, mas não consegue interpreta-la corretamente no nível submicro, pois sua representação se encontra adequada com o contexto da ligação enquanto que a sua interpretação conceitual não apresenta aspectos suficientes que indique compreensão do complexo no nível submicro.

O discente De15 também representou de forma bastante coerente a ligação de hidrogênio entre duas moléculas de água e de amônia, mas, da mesma forma não demonstrou aprofundamento conceitual, referindo-se à interação, na questão anterior, como sendo “*ligações entre átomos de hidrogênio*”. Trata-se, pois, de uma abordagem

genérica e confusa e sem base para qualquer interpretação como já discutido anteriormente. Assim, segundo Paris e Winograd (1990, apud RIBEIRO, 2003), na aprendizagem a metacognição envolve dois conceitos que abordam a reflexão sobre a organização e planificação das habilidades que estão atrelados aos processos cognitivos. Contudo o estudante De15 apresenta a utilização desses recursos metacognitivos na aprendizagem da representação do complexo da ligação de hidrogênio, porém ficaram ausentes na construção do conhecimento conceitual desta interação.

Por outro lado, o discente De17 apresentou tanto a definição como a representação de forma incorreta, pois na sua ilustração nenhum aspecto indicando a ligação de hidrogênio foi observado sinalizando a falta da organização e planificação dos processos cognitivos por parte deste participante. Por sua vez o discente De18 continua afirmando o seu desconhecimento acerca da ligação, sem responder esta questão, logo o mesmo não possui qualquer conhecimento sobre a ligação, em qualquer dos níveis do conhecimento químico (submicro, representacional e macro).

O discente De19 reproduz a interação entre as moléculas de água demonstrando falta de conhecimento em identificar e representar através das estruturas de Lewis o complexo, também tenta produzir a interação entre as moléculas de amônia, mas com estruturas desenhadas de uma forma bastante confusa. O discente De20 não conseguiu representar nenhuma ilustração representativa da ligação de hidrogênio, mesmo tendo detalhado na sua definição conceitual sobre este modelo de ligação toda a estrutura do complexo.

Associando as ilustrações do Quadro 12 e as interpretações conceituais desses estudantes com os níveis de conhecimento químico abordado por Johnstone (2006, tradução nossa), tem-se que alguns desses discentes do oitavo período expressaram conhecimento do nível representacional do complexo da ligação de hidrogênio – De14 e De15 – mas abordaram a definição de forma incorreta não destacando aspectos importantes desta ligação, ou seja, sem compreende-la no nível submicro. Enquanto que os discentes De17 e De19 apresentaram tanto a ilustração da ligação de hidrogênio como o discurso do conceito de forma incorreta, demonstrando não ter conhecimento desta interação nos níveis submicro e representacional. Vale salientar que De19 elaborou uma ilustração para o complexo deixando ausente detalhes importantes com a simbolização dos pares de elétrons livres no átomo central da molécula H₂O.

Explorando as respostas desses discentes na perspectiva cognitiva e baseando-se em Nascimento (2009) afirmando que os processos de compreensão e reflexão de um fenômeno natural gerando construção de hipóteses e abstração colabora para o desenvolvimento da aprendizagem do sujeito, como observou-se na representação da ligação de hidrogênio construído pelos discentes De14 e De15, ilustrando de forma bastante coerente com o modelo representacional deste complexo da ligação. Todavia, percebe-se através das ilustrações produzidas pelos discentes De17 e De19, que os mesmos não possuem este entendimento representacional desta interação, podendo-se inferir que no processo de aprendizagem destes discentes que, de acordo com Flavell (1979, tradução nossa), as suas experiências metacognitivas baseadas no aumento de complexidade foram ignoradas, comprometendo o resultado dos processos cognitivos.

Entre as diversas ilustrações produzidas pelos discentes em geral, uma outra opção de resposta poderia estar presente, sendo baseada no referencial de Housecroft e Sharpe (2012, tradução nossa). Estes Autores mencionam que as ligações de hidrogênio simétricas, como no caso de H_2O e NH_3 contendo o átomo de H entre os dois núcleos dos átomos de O e N, respectivamente, advém um alongamento considerável das ligações covalentes (O–H e N–H) originando duas interações $\text{O}\cdots\text{H}$ na estrutura da água e duas $\text{N}\cdots\text{H}$ na da amônia. Porém, nenhum dos discentes apresentou na sua ilustração este possível alongamento da ligação covalente resultando na formação de duas interações. Portanto, constatando que essa abordagem da ligação realizada por este referencial bibliográfico não foi captada pelos discentes que utilizaram deste material para estudo da interação.

Vale ressaltar que, mesmo sendo destacada na questão que os complexos das ligações de hidrogênio deveriam ser representados entre duas estruturas de H_2O e duas de NH_3 , alguns estudantes interpretaram a questão como sendo solicitado a ilustração da interação entre uma molécula de H_2O com outra de NH_3 , mas como o objetivo dessa pergunta foi conhecer como os graduandos representam a ligação de hidrogênio, então o propósito foi atingido.

Comparando as ilustrações dos discentes ingressantes com as do oitavo período, é considerável que a maioria dos discentes do primeiro grupo não ilustraram a ligação de hidrogênio de forma correta, mesmo alguns representando as estruturas das substâncias de forma aproximadamente correta, estando ausente na maioria das ilustrações os pares de elétrons livres dos átomos centrais. Contudo, dois estudantes

(Di2 e Di3) se aproximaram da representação correta do complexo da ligação, mas apresentaram equivocadamente a interação da mesma forma que as ligações covalentes, através de traços cheios (–), além também de não exibirem os pares de elétrons livres. Ao contrário dessa realidade dos ingressantes, uma maior quantidade de discentes do oitavo período representaram a interação nas ilustrações (De13, De14, De15 e De16). Entre estes discentes destacados, apenas um (De13) apresentou os polos negativos e positivos das ligações, complementando a sua compreensão acerca da ligação, em estudo, além deste estudante um outro (De11) também exibiu a localização dos polos no complexo, mas não representou a interação. Essa determinação das densidades eletrônicas na ligação de hidrogênio encontra-se ausente na análise das ilustrações dos discentes ingressantes e dos demais discentes do oitavo período.

6 CONCLUSÃO

Este TCC possui o objetivo de analisar as interpretações conceituais sobre a ligação de hidrogênio dos discentes ingressantes e do oitavo período de um curso de formação docente em Química, sendo obtido através de identificação das interpretações conceituais de estudantes ingressantes e do oitavo (8º) período no referido curso e a descrição de convergências e divergências existentes entre as definições destes dois grupos.

Analisando as interpretações conceituais dos discentes ingressantes identifica-se que estes estudantes possuem um conhecimento equivocado sobre a ligação de hidrogênio por utilizar de termos incoerentes com o contexto da interação, e também superficiais, visto que praticamente nenhum ingressante mencionou em suas definições os aspectos determinados no referencial da IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) que embasaram a análise conceitual realizada neste estudo, sendo estes: a (i) Interação atrativa; a (ii) Ligação covalente (X–H) com o elemento X sendo mais eletronegativo que o hidrogênio; a (iii) Evidência de formação de ligação; e a (iv) Interação do átomo de H com o fragmento aceitador de próton. Inclusive, esta incompreensão se reflete nas ilustrações construídas por estes estudantes, uma vez que apenas dois dos participantes deste grupo representaram a interação, mas de forma incoerente de acordo com o modelo atualizado da IUPAC. Dessa forma, demonstra-se que a maioria dos discentes que ingressam no curso de formação docente em Química iniciam a graduação sem qualquer aprofundamento conceitual e representacional da ligação de hidrogênio, conforme a definição atual.

Ao contrário do resultado dos discentes ingressantes, os estudantes do oitavo período demonstraram um maior conhecimento dos aspectos determinado na pesquisa, com base na IUPAC. Além disso, as representações do complexo da ligação construídas pelos discentes do oitavo período também demonstraram um maior conhecimento deste grupo acerca da ligação de hidrogênio, destacando que alguns discentes que não conseguiram conceituar a interação, ilustraram a mesma com as informações adequadas. Assim, constata-se que houve uma abordagem conceitual e representacional da ligação de hidrogênio durante os semestres acadêmicos do curso de formação docente em Química.

Em relação aos pontos de convergências das interpretações conceituais das duas turmas foram identificados a generalização da ligação de hidrogênio como forte

e também a sua contextualização como forma de definir a interação. As divergências entre as interpretações estão evidenciadas nos aspectos mencionados nas respostas dos discentes do oitavo período, visto que entre os discentes ingressantes praticamente nenhum abordou estes pontos e os que citaram não realizaram qualquer discussão, demonstrando desconhecer qualquer que seja os aspectos definidos pela IUPAC (ARUNAN *et al.*, 2011, tradução nossa) sobre a interação.

Então, a partir da análise comparativa das interpretações conceituais da ligação de hidrogênio percebe-se um avanço significativo dos discentes do oitavo período na compreensão do conceito, em relação aos discentes ingressantes. Pois, os discentes na fase final do curso abordaram os diversos aspectos, de forma sistematizada, considerados no estado da arte atual da ligação de hidrogênio, enquanto que os ingressantes apenas mencionaram um dos aspectos, inclusive sem qualquer discussão.

Relacionando os processos cognitivos e metacognitivos e os discentes ingressantes, tem-se que a memorização, compreensão e reflexão foram processos cognitivos ausentes na construção do conhecimento dos estudantes desse grupo sobre a definição da ligação de hidrogênio. E sem as ações de reflexão, logo estes discentes também não utilizaram de procedimentos autorreguladores, processos metacognitivos. Entre os discentes do oitavo período, demonstrou-se a presença de processos cognitivos – extração e captação – como também dos metacognitivos – autorregulação – na aprendizagem do conceito e representação da ligação de hidrogênio. Sendo uma interação com predominância entre as moléculas de água nos estados sólido e líquido, substância de extrema importância para a sobrevivência humana.

REFERÊNCIAS

- ARUNAN, Elangannan *et al.* Definition of the hydrogen bond (IUPAC Recommendations 2011). **Pure and applied chemistry**, v. 83, n. 8, p. 1637-1641, 2011.
- ARUNAN, E. MEETING REPORT: Hydrogen bonding and other molecular interactions. **Current Science**, v. 92, n. 1, p. 17-18, 2007.
- BEBER, Bernádette; SILVA, Eduardo da; BONFIGLIO, Simoni U. Metacognição como processo da aprendizagem. **Rev. Psicopedagogia**, v. 31, n. 95, p. 144-151, 2014.
- BOFF, Ms Daiane Scopel; ZANETTE, Carla Roberta Sasset. O desenvolvimento de competências, habilidades e a formação de conceitos: eixo fundante do processo de aprendizagem. In: V CONGRESSO INTERNACIONAL DE FILOSOFIA E EDUCAÇÃO, 5., 2010, Caxias do Sul. **Anais...** Caxias do Sul, 2010.
- BOOK, Gold. Compendium of chemical terminology. **International Union of Pure and Applied Chemistry**, v. 528, 2014.
- BRASIL. Ministério da Educação. Secretaria de Educação Básica. **Diretrizes Curriculares Nacionais Gerais da Educação Básica**. Brasília: MEC, SEB, DICEI, 2013. p. 27-29.
- BROWN, Theodore L.; LEMAY, Junior H. Eugene; BURSTEN, Bruce E. Conceitos básicos de ligação química. In: _____. **Química A Ciência Central**. 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005. cap. 8, p. 251-288.
- CAREGNATO, R. C. A; MUTTI, R. PESQUISA QUALITATIVA: ANÁLISE DE DISCURSO VERSUS ANÁLISE DE CONTEÚDO. **Texto Contexto Enferm**, Florianópolis, v. 15, n. 4, p. 679-684, out./nov. 2006.
- DA VEIGA SIMÃO, Ana Margarida; FRISON, Lourdes Maria Bragagnolo. Autorregulação da aprendizagem: abordagens teóricas e desafios para as práticas em contextos educativos. **Cadernos de Educação**, n. 45, p. 02-20, 2013.
- DESIRAJU, Gautam R. A Bond by Any Other Name. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 50, n. 1, p. 52-59, 2011.
- DUARTE, Hélio A. Ligações Químicas: Ligação Iônica, Covalente e Metálica. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, Juiz de Fora - MG, n. 4, p. 14-23, mai. 2001.
- FLAVELL, John H. Metacognition and cognitive monitoring: A new area of cognitive-developmental inquiry. **American Psychologist**, v. 34, n. 10, p. 906-911, 1979.
- FLAVELL, John H. Speculations about the nature and development of metacognition. In: WEINERT, F.; KLUWE, R. Metacognition, motivation, and understanding. **Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum**, p. 21-29, 1987.

FONSECA, Vitor da. Dislexia, cognição e aprendizagem: uma abordagem neuropsicológica das dificuldades de aprendizagem da leitura. **Revista psicopedagogia**, v. 26, n. 81, p. 339-356, 2009.

GERHARDT, *et al.* UNIDADE 4 – ESTRUTURA DO PROJETO DE PESQUISA. In: GERHARDT, Tatiana Engel; SILVEIRA, Denise Tolfo. **Métodos de Pesquisa**. Porto Alegre: Editora UFRGS, 2009. cap. 4, p. 65-88.

GOULART, Sílvia Moreira. História da ciência: elo da dimensão transdisciplinar no processo de formação de professores de ciências. In: LIBANEO, J.C; SANTOS, Akiko (orgs). **Educação na era do conhecimento em rede e transdisciplinaridade**. Campinas, SP: Alínea, 2005.

GRABOWSKI, Sławomir J. Hydrogen Bond – Definitions, Criteria of Existence and Various Types. *In*: _____. **Understanding Hydrogen Bonds: Theoretical and Experimental Views**. 1. ed. Royal Society of Chemistry, 2020. cap. 1, p. 1-40.

HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. **Inorganic Chemistry**. 4. ed. Editora Pearson, 2012. 1257 p.

HOW do I find the dipole moment?. 2020. Disponível em: <https://www.quora.com/How-do-I-find-the-dipole-moment>. Acesso em: 30 abr. 2021.

INTERMOLECULAR Forces. Disponível em: <https://www.chem.fsu.edu/chemlab/chm1046course/interforces.html>. Acesso em: 28 de mar. de 2021.

INTERMOLECULAR and Intramolecular Forces. Disponível em: <https://ch301.cm.utexas.edu/pdfs/im-forces.pdf>. Acesso em: 10 de dez. de 2021.

JOHNSTONE, A. H. Chemical education research in Glasgow in perspective. **Chemistry Education Research and Practice**, v.7, n.2, p.49-63, 2006. Disponível em: http://www.rsc.org/images/AHJ%20overview%20final_tcm18-52107.pdf. Acesso em: 12 fev. 2021.

JUNQUEIRA, Marianna Meirelles. **Um estudo sobre o tema interações intermoleculares no contexto da disciplina de Química Geral**: a necessidade da superação de uma abordagem classificatória para uma abordagem molecular. 2017. 275 folhas. Tese (Doutorado em Ensino de Química) - Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências, São Paulo.

LEE, J.D. Hydrogen and the hydrides. In: _____. **CONCISE INORGANIC CHEMISTRY**. 4. ed. Tóquio: CHAPMAN & HALL. 1991. cap. 8, p. 240-272.

LIMA, Luís S. Interações de van der Waals. **Revista de Ciência Elementar**, Porto - Portugal, v. 2, n.1, p. 01-02, jan./mar. 2014.

MIRANDA, Ana Carolina Gomes. **Transição Progressiva dos modelos explicativos de estudantes do nível médio sobre Forças Intermoleculares**.

2018. 291 f. Tese (Doutorado em Educação em Ciências: Química da Vida e Saúde) - Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria.

MOROSINI, M.C. (Org.). **Enciclopédia de Pedagogia Universitária**. Porto Alegre: FAPERGS/RIES, 2006. v. 2. Disponível em: <http://portal.inep.gov.br/documents/186968/484184/Enciclop%C3%A9dia+de+pedagogia+universit%C3%A1ria+gloss%C3%A1rio+vol+2/b9d6f55d-1780-46ef-819a-cdc81ceeac39?version=1.0>. Acesso em: 27 fev. 2021.

NASCIMENTO, Ruben de Oliveira. Processos cognitivos como elementos fundamentais para uma educação crítica. **Ciências & Cognição**, v. 14, n. 1, p. 265-282, 2009.

OLIVEIRA, Boaz G.; ARAÚJO, Regiane C. M. U. LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO OU INTERAÇÃO DE VAN DER WAALS?. **Química Nova**, v. 35, n. 10, p. 2002-2012, set. 2012.

PAULING, Linus. The Hydrogen Bond. *In*: PAULING, Linus. **The Nature Of The Chemical Bond**. Thirdedition. Cornell University Press: Ithaca, 1960.

PRODANOV, Cleber Cristiano; DE FREITAS, Ernani Cesar. **Metodologia do trabalho científico: métodos e técnicas da pesquisa e do trabalho acadêmico**. 2. ed. Editora Feevale, 2013.

RAIMUNDO, Luís Henrique; SILVA, Isabela Paula da; LARANJEIRA, Jane Maria Gonçalves. INTERPRETAÇÕES CONCEITUAIS DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO NOS REFERENCIAIS BIBLIOGRÁFICOS DE QUÍMICA INORGÂNICA NO ENSINO SUPERIOR. *In*: CONGRESSO NACIONAL DE EDUCAÇÃO, 09, 2018, Recife – PE. **Anais Eletrônicos**. Recife: Editora Realize Eventos Científicos, 2018. Disponível em: https://editorarealize.com.br/revistas/conedu/trabalhos/TRABALHO_EV117_MD4_SA16_ID8739_09092018194837.pdf. Acesso em 18 de out. 2019.

RIBEIRO, Célia. Metacognição: um apoio ao processo de aprendizagem. **Psicologia: Reflexão e Crítica**, v. 16, n. 1, p. 109-116, 2003.

ROCHA, Willian R. Interações Intermoleculares. **Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola**, Juiz de Fora - MG, n. 04, p. 31-36, mai. 2001.

SERIBELI, Fábio Luiz. Interações intermoleculares: o estado da arte da pesquisa em ensino e desenvolvimento de atividades práticas experimentais sobre o tema. **Scientia Vitae**, São Paulo – SP, v. 07, n. 23, p. 19-20, jan./mar. 2019.

SHRIVER, D.F.; ATKINS, P.W. **Inorganic Chemistry**. 5. ed. Great Britain: W. H. Freeman and Company, 2010, 851 p.

SILVA, Gabriele Bonotto; FELICETTI, Vera Lucia. Habilidades e competências na prática docente: perspectivas a partir de situações-problema. **Educação por escrito**, v. 5, n. 1, p. 17-29, 2014.

Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG). Sólidos cristalinos. Química Geral Departamento de Química – UFMG, 2012. Disponível em: http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?attachment_id=497. Acesso em: 19 set. 2020.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO. **PROJETO PEDAGÓGICO DO CURSO DE QUÍMICA – LICENCIATURA**. Caruaru: UFPE, 2013. Disponível em: <https://www.ufpe.br/documents/509751/0/PPC/6d8e3de2-54f0-4c40-adac-12b8cf0681fe>. Acesso em: 09 jul. 2020.