



Departamento de Química
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

**SIMULAÇÕES *ON-LINE* PARA O ENSINO E
APRENDIZAGEM DE QUÍMICA**

Manuel Eduardo Fernandes Salgueiro

Janeiro de 2003



FC

Biblioteca
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto



D000065570



Departamento de Química
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

**SIMULAÇÕES *ON-LINE* PARA O ENSINO
E APRENDIZAGEM DE QUÍMICA**

Tese orientada por:

Professor Doutor João Carlos de Matos Paiva - Universidade do Porto

Professor Doutor Jorge Marques Gonçalves - Universidade do Porto

*De acordo com
o Professor de Física
27/6/2003
Manuel Eduardo Fernandes Salgueiro*

UNIVERSIDADE DO PORTO
BIBLIOTECA
Sala _____
Coloc. <i>TMUP</i>
N.º <i>8746</i>
Depart. Química

38

Manuel Eduardo Fernandes Salgueiro

Dissertação submetida à Faculdade de Ciências da Universidade do
Porto para obtenção do grau de Mestre em Química para o Ensino

Janeiro de 2003

Agradecimentos

Correndo sempre o risco de cometer a injustiça (de que antecipadamente me penitencio) de me esquecer de todas as pessoas que, de alguma forma, directa ou indirectamente, me apoiaram e contribuíram para a realização deste trabalho, gostaria de expressar os meus sinceros agradecimentos:

Ao Professor Doutor João Carlos de Matos Paiva, orientador desta tese, por todo o apoio prestado desde o seu primeiro momento, desde a escolha do tema, pela sua disponibilidade e pelo estímulo transmitido, pelos seus comentários e sugestões, pela leitura e revisão do texto.

Ao Professor Doutor Jorge Marques Gonçalves, co-orientador, pela sua disponibilidade, pelos seus comentários e sugestões pertinentes, pela sua leitura e revisão do texto.

Ao Professor Doutor Duarte Costa Pereira, pela sua preciosa ajuda no que se refere ao tratamento estatístico dos estudos realizados.

À Professora Doutora Maria Gabriela Ribeiro, por me ter permitido a consulta da sua bibliografia, em especial pela consulta actualizada do *Journal of Chemical Education*.

Ao Eng^o Ilídio Martins, pela sua disponibilidade, pelos seus conhecimentos e pela sua arte na programação das simulações.

A todos os alunos que participaram neste trabalho, sem os quais tal não seria possível.

À Maria José e à Rita, pela paciência e compreensão infinitas durante todo este trabalho.

Lista de abreviaturas

ADN: Ácido desoxirribonucleico

e. g.: *exempli gratia* (por exemplo)

GHz: Giga (10^9) hertz

GR: Ganho residual

GRC: Ganho residual corrigido

GRCM: Ganho residual corrigido médio

IAC: Instrução assistida por computador

IUPAC: *International Union of Pure and Applied Chemistry*

MBL: *Microcomputer Based Laboratory* (laboratório computadorizado)

PC: *Personal Computer* (computador pessoal)

PDA: *Personal Digital Assistant* (computador de bolso)

PVC: poli (cloreto de vinilo)

PTN: Condições normais de pressão e de temperatura ($P = 1 \text{ atm}$; $t = 0^\circ \text{ C}$)

SI: Sistema Internacional de unidades

TIC: Tecnologias de informação e comunicação

vs: *versus*

Resumo

Este estudo teve como objectivos principais produzir, implementar e avaliar o impacto de simulações computacionais *on-line* no ensino e aprendizagem de conceitos de Química.

Foram desenvolvidas várias simulações apoiadas por pequenos filmes vídeo *on-line*, que são descritas neste trabalho.

Ao nível do 9º ano de escolaridade, foi desenvolvido e avaliado um conjunto de simulações relativo à polaridade / não polaridade de algumas moléculas. Os sujeitos do estudo foram 37 alunos de duas turmas do 9º ano da Escola Secundária de Alijó e decorreu durante o ano lectivo 2001/2002. Os conteúdos foram leccionados, nas duas turmas, de forma tradicional, tendo-se acrescentado um conjunto de simulações em computador numa das turmas (grupo experimental). O impacto foi avaliado através de um conjunto de questões incluídas em teste sumativo.

No 12º ano de escolaridade, investigou-se o impacto de uma simulação acerca da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. Para este estudo, foram realizadas entrevistas a alunos da mesma escola, também no ano lectivo 2001/2002. Neste caso, os alunos foram entrevistados após ensino dos conteúdos, no sentido de detectar dificuldades relativamente aos mesmos. Após visualização da simulação, os mesmos alunos foram novamente entrevistados no sentido de avaliar em que medida a simulação se revelou ou não eficaz na resolução das dificuldades anteriormente apresentadas.

Em ambos os casos os resultados revelaram a utilidade das simulações, no sentido de promover uma melhor visualização e compreensão dos fenómenos envolvidos, podendo ser uma hipótese para um ensino mais atraente e para despertar o gosto pelo estudo da Química.

Sugerem-se, finalmente, hipóteses de desenvolvimento futuro.

Abstract

The study which follows had as main goals to produce, implement and evaluate the impact of on-line computational simulations in Chemistry teaching and learning.

Several simulations were developed and supported by small on-line video films, which are described in this work.

In the 9th grade, it was developed a set of simulations related to the polarity / non-polarity of some molecules. The subjects of the study were 37 students of two classes from Alijó Secondary School during the school year of 2001/2002. The contents were taught, in both classes, in a traditional way, having been added a set of simulations with a computer in one of the classes (the experimental group). The impact was evaluated through a set of questions included in a summative test.

In the 12th grade, it was researched the impact of a simulation about the instant dipole - induced dipole intermolecular bonds. For this study, interviews were done to students of the same school, also on the school year of 2001/2002. The students were interviewed after the teaching of the contents, in order to detect difficulties about them. After the visualization of the simulation, the same students were interviewed again in order to evaluate if the simulation revealed to be efficient or not in the resolution of the previous difficulties.

In both cases the results revealed the utility of simulations in the sense of promoting a better visualization and understanding of the involved phenomena, being an hypothesis for a more attractive teaching and also to increase the taste for the study of Chemistry.

Finally, hypotheses of future development are suggested.

Índice

Agradecimentos	II
Lista de abreviaturas	III
Resumo	IV
Abstract	V
Índice de figuras	X
Índice de gráficos	XIII
Índice de tabelas	XIV
1- Introdução	1
1.1. Computadores por todo o lado	2
1.2. Estrutura da dissertação	3
2- As TIC no ensino das ciências	5
2.1. Breve retrospectiva	6
2.2. Os computadores e a Química	6
2.2.1. Simulações em computador no ensino e aprendizagem da Química	7
2.2.2. Revisão de alguns estudos sobre simulações computacionais em Química	10
2.3. Simulações <i>on-line</i>	14
2.3.1. Vantagens das simulações <i>on-line</i>	16
2.3.2. Constrangimentos das simulações <i>on-line</i>	16
3- Forças intermoleculares	18
3.1. Definição	19
3.2. Dipolo eléctrico	19
3.2.1. Interações entre dipolos	20
3.2.2. Moléculas polares e moléculas apolares	21
3.2.3. Momentos de dipolo induzidos	22
3.3. Tipos de forças intermoleculares	22
3.3.1. Ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido	23

3.3.2. Ligação dipolo permanente - dipolo permanente	25
3.3.3. Ligação dipolo permanente - dipolo induzido	26
3.3.4. Ligação ião - dipolo	27
3.3.5. Ligação de hidrogénio	28
3.3.6. Ligação iónica	30
3.4. Importância das forças intermoleculares	31
3.4.1. Estados físicos	31
3.4.2. Mudanças de estado físico	32
3.4.2.1. Mudanças de estado físico e forças de dispersão	33
3.4.2.2. Mudanças de estado físico e ligações de hidrogénio	35
3.5. Repulsões e interacções globais	36
4- Caso I: Ensino da polaridade molecular no 9º ano	38
4.1. Contexto	39
4.1.1. Contexto científico - pedagógico	39
4.1.1.1. Electrização por contacto	42
4.1.1.2. Electrização por influência	42
4.1.1.3. Electrização por fricção	43
4.1.1.4. Teste experimental de polaridade molecular	45
4.1.2. Ponto da situação na <i>Web</i>	48
4.2. Simulação <i>on-line</i> desenvolvida	48
4.2.1. Descrição da simulação	48
4.2.2. Disponibilização na <i>Web</i>	52
4.2.3. Roteiro de exploração	54
4.3. Metodologia	54
4.3.1. Tipo de estudo	54
4.3.2. Caracterização da amostra	55
4.3.3. Limitações do estudo	58

4.3.4. Hipótese em estudo	59
4.3.5. Procedimento	59
4.4. Análise dos resultados	61
5- Caso II: Ensino da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido no 12º ano	67
5.1. Contexto	68
5.1.1. Contexto científico - pedagógico	68
5.1.2. Ponto da situação na Web	69
5.2. Simulação <i>on-line</i> desenvolvida	70
5.2.1. Descrição da simulação	70
5.2.2. Disponibilização na Web	72
5.3. Metodologia	73
5.3.1. Tipo de estudo	73
5.3.2. Caracterização da amostra	74
5.3.3. Limitações do estudo	74
5.3.4. Procedimento	75
5.4. Análise dos resultados	76
6- Conclusões	81
Bibliografia	87
Glossário	94
Anexos	100
Anexo I- Endereços de <i>sites</i> recomendados para o ensino e aprendizagem de Química	101
Anexo II- Roteiro de exploração (9º ano)	104
Anexo III- Dados de natureza quantitativa (pré-teste)	114
Anexo IV- Teste sumativo (pós-teste)	116
Anexo V- Resultados do teste sumativo (pós-teste)	120
Anexo VI- Valores calculados para os ganhos de aprendizagem	123

	Índice
Anexo VII- Entrevista (12º ano) - parte I	125
Anexo VIII- Entrevista (12º ano) - parte II	127
Anexo IX- Transcrição das entrevistas (12º ano)	129
Anexo X- Endereços de simulações sobre ligações intermoleculares	165

Índice de figuras

Figura 1.1-	Organização da dissertação	4
Figura 2.1-	Imagem de entrada do programa <i>Le Chat II</i>	9
Figura 2.2-	Imagem de simulação da separação das bases citosina e guanina no ADN	9
Figura 2.3-	Imagem de simulação do acerto de equações químicas	10
Figura 2.4-	Imagem de simulação <i>on-line</i> da experiência de Rutherford	15
Figura 2.5-	Imagem principal de simulação <i>on-line</i> que permite misturar as cores primárias da luz	15
Figura 2.6-	Imagem de simulação <i>on-line</i> da relação entre pressão e temperatura, a volume constante, para um gás ideal	16
Figura 3.1-	Ligações intramoleculares vs ligações intermoleculares em moléculas de HCl	19
Figura 3.2-	Representação de um dipolo eléctrico	20
Figura 3.3-	Esquema dos dipolos eléctricos em H ₂ O e HCl	20
Figura 3.4-	Representação de dipolos eléctricos em H ₂ O e em HCl.	20
Figura 3.5-	Interpretação da polaridade de O ₃	21
Figura 3.6-	Momento de dipolo não nulo em H ₂ O. Representação simplificada de H ₂ O como molécula polar	22
Figura 3.7-	Interpretação do momento de dipolo nulo em CO ₂	22
Figura 3.8-	Representação da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido	24
Figura 3.9-	Representação de interacções entre moléculas de HCl	25
Figura 3.10-	Representação da orientação de dois dipolos permanentes	25
Figura 3.11-	Representação da orientação de dois dipolos permanentes	25
Figura 3.12-	Orientação paralela de dois dipolos permanentes	26
Figura 3.13-	Representação da interacção dipolo permanente - dipolo induzido	26

Figura 3.14- Representação de interacções ião - dipolo em NaCl / H ₂ O	27
Figura 3.15- Representação de interacção ião-dipolo	28
Figura 3.16- Representação de ligações de hidrogénio em H ₂ O e em H ₂ O / NH ₃	29
Figura 3.17- Fórmula de estrutura e representação de ligações intramoleculares de hidrogénio no ácido málico	29
Figura 3.18- Representação de ligações de hidrogénio na molécula de ADN	30
Figura 3.19- Representação de ligações de hidrogénio numa proteína	30
Figura 3.20- Interacção iónica	30
Figura 3.21- Fórmula de estrutura do glicerol	32
Figura 3.22- Interpretação dos pontos de ebulição de pentano e de tetrametilmetano	35
Figura 3.23- Representação genérica de curva de energia potencial para uma molécula	36
Figura 3.24- Relação entre os parâmetros ϵ e r_0 da curva de energia potencial de Lennard-Jones	37
Figura 4.1- Electroscópio; representação simplificada	41
Figura 4.2- Representação da electrização de um electroscópio por contacto	42
Figura 4.3- Electrização por influência	42
Figura 4.4- Representação da electrização de um objecto de plástico por um pano de lã	44
Figura 4.5- Representação da electrização de um objecto de vidro por um pano de seda	44
Figura 4.6- Esquema de montagem para provar experimentalmente que quando um objecto é friccionado, o excesso de electrões com que um objecto fica é igual à deficiência com que fica o outro	44
Figura 4.7- Esquema de montagem para testar a polaridade molecular	45
Figura 4.8- Imagem de vídeo do esquema de montagem para testar a polaridade da acetona	45
Figura 4.9- Interpretação do comportamento de H ₂ O perante um objecto electrizado	46

Figura 4.10- Interpretação do comportamento de CCl_4 perante um objecto electrizado	47
Figura 4.11- Imagem de entrada da simulação “Interacções”	49
Figura 4.12- Janela mostrando substâncias a escolher para testar a polaridade das respectivas moléculas	50
Figura 4.13- Janela mostrando materiais a escolher para electrizar	50
Figura 4.14- Imagem do teste de polaridade com acetona	51
Figura 4.15- Visualização macroscópica e interpretação microscópica do comportamento de um fio de água perante um objecto de plástico electrizado	51
Figura 4.16- Imagens de simulação da electrização de uma barra de plástico e sua aproximação a um fio de água	52
Figura 4.17- Imagem de entrada no “Molecularium” na <i>Internet</i>	52
Figura 4.18- Imagem de entrada de “Ligações intermoleculares” na <i>Internet</i>	53
Figura 4.19- Imagem de entrada da simulação “Interacções” na <i>Internet</i>	53
Figura 5.1- Imagem estática final da simulação “Dipolo”, na sua primeira versão	71
Figura 5.2- Imagem estática final da simulação “Dipolo”, na sua segunda versão	71
Figura 5.3- Imagem da simulação “Dipolo” evidenciando a utilização do comando “AVANÇAR” para a visualização do movimento de cargas eléctricas durante a formação dos dipolos induzidos	72
Figura 5.4- Imagem estática final da simulação “Dipolo”, na sua terceira versão	73
Figura 5.5- Imagem final da simulação “Dipolo” (3ª versão) na <i>Internet</i>	73

Índice de gráficos

Gráfico 3.1- Relação entre pontos de ebulição e pontos de fusão de algumas moléculas com o seu tamanho e número de electrões	33
Gráfico 3.2- Efeito das ligações de hidrogénio sobre o ponto de ebulição de algumas moléculas	35
Gráfico 4.1- Comparação dos resultados (média dos testes) do grupo de controlo e do grupo experimental antes de ensino diferenciado	56
Gráfico 4.2- Comparação dos resultados (médias em percentagem), por questão, do grupo experimental e do grupo de controlo após ensino diferencial	62
Gráfico 4.3- Representação dos resultados do pós-teste em função do pré-teste	63
Gráfico 4.4- Comparação dos ganhos residuais corrigidos (GRC) individuais no grupo de controlo e no grupo experimental	64
Gráfico 4.5- Comparação entre o número de alunos a responder correctamente às questões relativas à polaridade de H_2O	66

Índice de tabelas

Tabela 2.1-	Resumo de alguns estudos envolvendo simulações computacionais em Química	13
Tabela 3.1-	Constantes dieléctricas de alguns líquidos puros, a 25° C	28
Tabela 3.2-	Resumo das características essenciais das diversas forças intermoleculares e da ligação iónica	32
Tabela 3.3-	Relação entre forças de dispersão, pontos de ebulição e estado físico nalguns alcanos	34
Tabela 3.4-	Comparação entre pontos de ebulição de dois alcanos isómeros	34
Tabela 3.5-	Parâmetros de Lennard-Jones de algumas moléculas	37
Tabela 4.1-	Série triboelétrica	43
Tabela 4.2-	Parâmetros estatísticos dos grupos de controlo e experimental antes de ensino diferencial	57
Tabela 4.3-	Parâmetros estatísticos dos grupos de controlo e experimental relativamente à média dos testes antes de ensino diferencial	57
Tabela 4.4-	Resultados do grupo de controlo vs grupo experimental nas questões de polaridade molecular após ensino diferencial	61
Tabela 4.5-	Parâmetros estatísticos dos grupos de controlo e experimental após ensino diferencial	62
Tabela 4.6-	Comparação dos parâmetros estatísticos relativos aos GRCM no grupo controlo e no grupo experimental	64

Capítulo 1

Introdução

1- Introdução

1.1. Computadores por todo o lado

Os computadores vieram revolucionar a forma como toda uma série de actividades são desenvolvidas, bem como a própria vida do Homem. O seu impacto na humanidade é comparável ao da criação da agricultura e ao da revolução industrial (Toffler, 2000). Hoje em dia são ferramentas de trabalho indispensáveis e quase omnipresentes. A sua utilização é quase inumerável: desde a simples utilização como fonte de diversão (jogos, filmes, *etc*) ou para processamento de texto, até à sua utilização em investigação científica (cálculos que na sua ausência poderiam levar anos a realizar, modelação, estudos dinâmicos de novas substâncias a introduzir como medicamentos, *etc*) ou ainda como forma de automatizar e até substituir o Homem em muitas tarefas (Gates, 1999). A lista seria interminável, podendo afirmar-se que quase não se pode viver sem os computadores, pelo menos no actual estilo de vida da sociedade ocidental (Negroponte, 1995).

É frequente apontar-se o desemprego como um dos males trazidos pelos computadores, pela substituição que fizeram da mão de obra humana em muitas actividades. Convém, entretanto, não esquecer que a indústria de computadores e áreas relacionadas gerou uma série de postos de trabalho e de emprego anteriormente inexistentes: *software*, fabrico dos microprocessadores, montagem de computadores, nas telecomunicações, empregos relacionados com a *Internet*, são apenas alguns exemplos. Feito o balanço entre prós e contras, muito provavelmente os ganhos serão maiores que as perdas.

O ensino, embora sofra de alguma “inércia” e as mudanças não se façam à velocidade desejável (Papert, 1994), não é excepção à influência do uso de computadores. A sua utilidade no contexto educativo parece inegável (Suppes, 1992), apesar de alguma desilusão relativamente a um uso mais maciço atribuída, sobretudo, à resistência dos professores (Miller e Olsen, 1994), que, por falta de contacto e experimentação dos computadores e das tecnologias da informação e comunicação (TIC) em sentido lato, não reconhecem as suas potencialidades e as afastam da sua prática (Paiva, 2002).

Sendo a Química uma ciência do infinitamente pequeno, a compreensão adequada de muitos dos seus fenómenos implica necessariamente a sua *visualização mental*. As simulações em computador têm-se revelado, neste sentido, uma ferramenta pedagógica de valor acrescentado. Sendo a *Internet* o espaço ideal para a disseminação da informação, a utilização e exploração de simulações *on-line* para se aprender e ensinar Química é bastante oportuna.

1.2. Estrutura da dissertação

O trabalho que a seguir se apresenta teve como objectivos principais produzir e avaliar o impacto da utilização de simulações computacionais no ensino e aprendizagem de conteúdos de Química, tendo decorrido numa dupla vertente:

- 1- Simulação da polaridade / não polaridade molecular, ao nível do 9º ano de escolaridade.
- 2- Simulação da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, ao nível do 12º ano de escolaridade.

O processo começou com a selecção dos conteúdos específicos, tendo-se feito o levantamento de dificuldades relacionadas com o ensino e aprendizagem dos mesmos. Este levantamento foi realizado com base em bibliografia e tendo igualmente em linha de conta uma experiência própria enquanto professor. De modo a superar os problemas detectados anteriormente, colocaram-se as seguintes hipóteses:

- 1- Será que o ensino da polaridade e não polaridade molecular auxiliada por simulações em computador se revela eficaz no processo de ensino / aprendizagem destes conceitos, ao nível do 9º ano de escolaridade?
- 2- Quais os benefícios, para os alunos do 12º ano, de uma simulação da ligação intermolecular dipolo instantâneo - dipolo induzido?

Verificou-se, então, o que existia na *Web* sobre o assunto e, não se tendo encontrado nada específico com valor acrescentado, partiu-se para a construção de simulações em computador com o objectivo de visualizar e compreender os fenómenos envolvidos em cada caso. A disponibilização na rede foi o passo seguinte.

As simulações foram utilizadas e exploradas durante as aulas, tendo-se avaliado o seu efeito em termos dos resultados obtidos através da avaliação. Dos resultados extraíram-se conclusões e apontam-se sugestões para estudos futuros.

O diagrama seguinte (figura 1.1) resume as principais fases do trabalho.

No endereço www.educa.fc.up.pt/investiga/teses/salgueiro é possível a consulta desta tese *on-line*. Está igualmente disponível em CD-ROM no final desta dissertação.

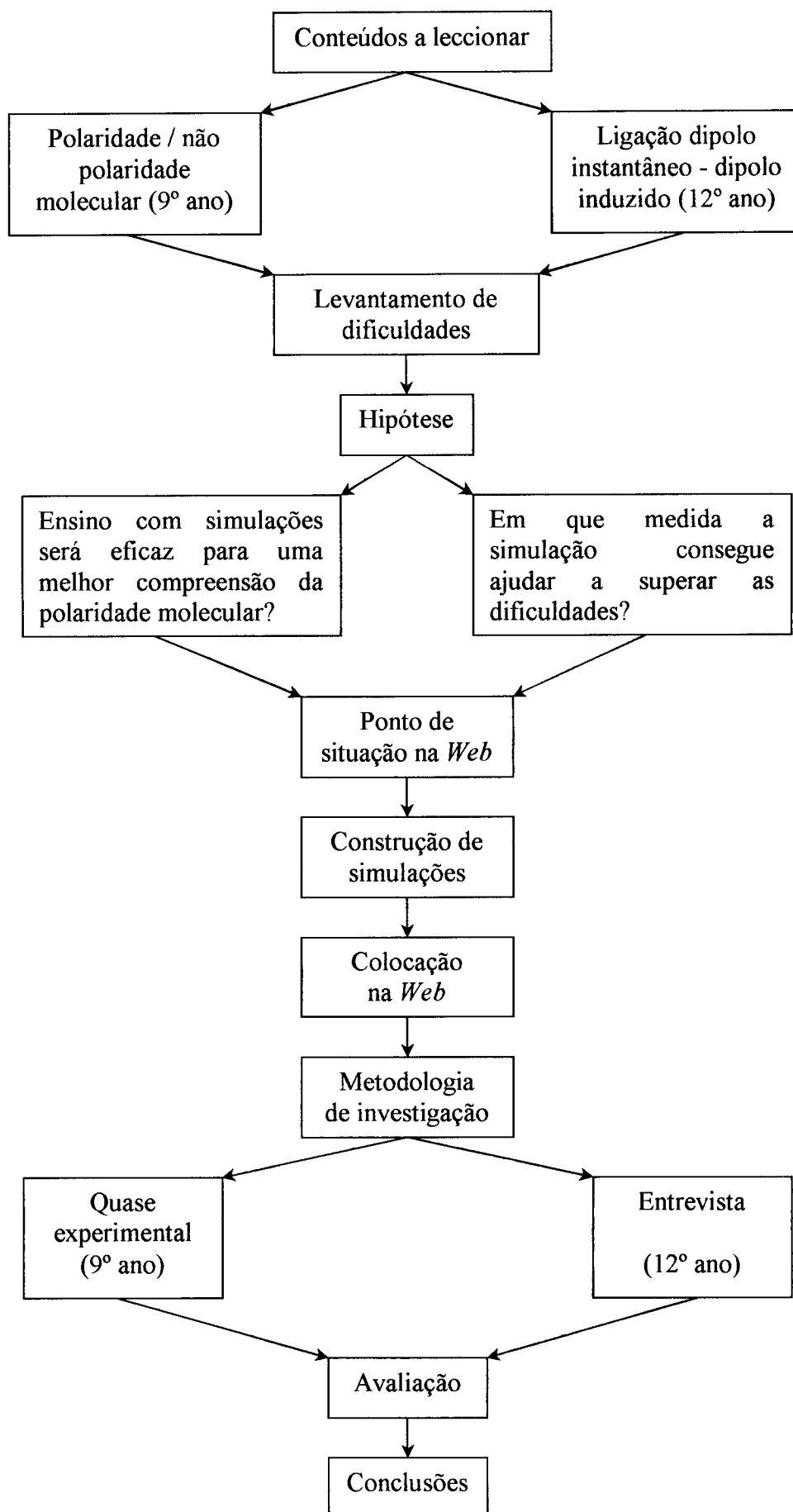


Figura 1.1- Organização da dissertação.

Capítulo 2

As TIC no ensino das ciências

2- As TIC no ensino das ciências

2.1. Breve retrospectiva

A utilização das TIC no ensino das ciências está inevitavelmente ligada ao desenvolvimento dos computadores pessoais (PCs), nos finais da década de 70 do século XX. Este desenvolvimento está, por sua vez, intimamente relacionado com o dos microprocessadores, cujo desempenho tem sido assinalável (<http://tek.sapo.pt/comp>; <http://www.pcmag.com>) e, ainda, por preços acessíveis que têm permitido a sua massificação. De facto, desde o famoso *ENIAC* (*Electronic Numerical Integrator and Calculator*), criado em 1946, com 30 toneladas, cerca de 18 000 válvulas e capaz de efectuar 500 multiplicações e 5000 adições por segundo (<http://www.nunoportugal.com/microlusa/histcomp/comp.htm>), até aos mais recentes computadores de secretária e portáteis que operam acima dos 3 GHz, os *tablet* PC e computadores de bolso (PDAs, *Personal Digital Assistants*), os progressos são assinaláveis (<http://www.pcmag.com>).

Assim, no século XX, o período que vai da década de 60 até finais da década de 70 é referido pela literatura como a era do uso de meios analógicos (filmes e vídeos) no ensino. A utilização de meios digitais deu-se na década de 80 (Brown, 1999). Foi durante esta década que apareceram as simulações em computador e foi também nesta altura que apareceu o CD-ROM, em 1985. Na década de 90 assistiu-se ao continuado desenvolvimento dos computadores, à descida do seu custo e a tendências inovadoras, como a realidade virtual e a inteligência artificial.

2.2. Os computadores e a Química

A Química não escapa à “fatalidade” do uso dos computadores e das TIC. É de referir, a título de exemplo:

- Tratamento de dados / estatística através de folhas de cálculo que poupam tempo ao utilizador.
- Cálculos que seriam infinitamente demorados, como é o caso da resolução de equações relativas à mecânica quântica.
- Aquisição de dados através de interfaces que permitem a aquisição e tratamento, em tempo real, de dados através de sensores. São disto exemplos a possibilidade da realização de uma titulação de ácido-base e a construção simultânea da respectiva curva de titulação, com utilização de sensores de pH; a verificação da lei de Boyle-Mariotte através de sensores de pressão; a verificação da relação entre pressão e

temperatura (a volume constante) para um gás através da utilização simultânea de sensores de pressão e de temperatura.

- Exploração de *software* didáctico específico para ensino / aprendizagem de Química. É o caso, por exemplo, de programas para ensino de equilíbrio químico ou para o ensino da constituição da matéria.
- Modelação da interacção de novos fármacos e medicamentos investigados no tratamento de doenças, como seja a descoberta de novos agentes no combate ao cancro (<http://members.ud.com/projects/cancer/index.htm>).
- Simulações em computador quer em termos de investigação (interacção de uma enzima com o substrato, por exemplo), quer para o ensino / aprendizagem de Química (experiência de Rutherford, por exemplo).
- Automatização de diversas técnicas: cromatografia, interpretação de espectros, quantificação de analitos, *etc.*

De facto, a relação entre computadores e a Química é (ou pode ser) muito estreita, tendo justificado a atribuição de um Prémio Nobel, em 1998, a Walter Kohn e John Pople, pelos seus estudos que possibilitaram o uso de equações complexas da mecânica quântica para o estudo de moléculas e processos moleculares com o auxílio dos computadores (<http://www.nobel.se/chemistry/laureates/1998/index.html>).

2.2.1. Simulações em computador no ensino e aprendizagem da Química

Nos últimos anos, no âmbito das TIC, as simulações computacionais têm registado um desenvolvimento assinalável e uma aplicação crescente em termos do ensino e aprendizagem. As simulações em computador consistem basicamente em programas ou ambientes gerados em computador que contêm um modelo subjacente e onde o objectivo é que o utilizador / aprendiz infira o modelo, que interaja, que interiorize e consubstancie aprendizagens. Pretende-se, desta forma, que o aprendiz participe de uma forma activa na descoberta do conhecimento numa perspectiva construtivista (Joolingen, 1999). No ensino, as simulações em computador representam experiências da realidade que:

- Ou são difíceis de visualizar sem o recurso ao computador. É o caso, por exemplo, da manipulação de variáveis (temperatura, concentração, pressão) sobre o estado de equilíbrio químico (Paiva, 2000) ou a propagação de ondas mostrando fenómenos de interferência (Cox, 1992).

- Ou são perigosas, caras ou muito morosas (Cox, 1992).

As simulações são ainda indicadas quando está em causa a segurança. É o caso da simulação da produção de ácido sulfúrico (Cox, 1992).

Do ponto de vista pedagógico, as simulações apresentam algumas vantagens que poderão ser enumeradas (Russell *et al*, 1997):

- Possibilidade de visualizar fenómenos químicos quer à escala macroscópica quer microscópica, fazendo a ligação entre este dois “mundos”.
- Facilidade de reprodução a maior ou menor velocidade.
- Possibilidade de um sem-número de repetições do mesmo fenómeno.
- Eliminação dos custos das experiências laboratoriais, acrescentando ainda a possibilidade de um laboratório sempre limpo e de um número infinito de repetições.
- Interactividade, permitindo ao utilizador uma participação activa e a possibilidade de seleccionar o que pretende experimentar.
- Possibilidade de se interagir sem receio de errar (tantas vezes os alunos se inibem, nas aulas, de participar com receio de errar) ou até de danificar material (em actividades experimentais, por exemplo).

Deve, contudo, chamar-se a atenção para o facto de as simulações serem uma alternativa à realidade, não a realidade (Brown, 1999). Pretende-se, deste modo, alertar para o facto de que uma simulação não deve substituir o trabalho experimental e de laboratório que esses, sim, traduzem a realidade. As simulações imitam e são uma espécie de *zoom* dos fenómenos à escala microscópica e, em determinadas situações, poderão ser a única forma de se poderem ver e entender esses fenómenos (*e.g.*, a simulação de uma reacção química).

Como exemplos de simulações computacionais em assuntos de Química, poderão citar-se, sobre equilíbrio químico, o *Great Chemical Bead Game* (Cullen, Jr, 1989) ou o *Le Chat II* (Paiva, 2000 - figura 2.1), o *4M:CHEM* (Russell *et al*, 1997) sobre ácido-base e equilíbrio químico, o *Chemland* (*download* a partir de <http://soulcatcher.chem.umass.edu/cgi-bin/pickPage.cgi?downloads.html>) sobre cromatografia líquida (figura 2.2) ou, para acerto de equações químicas, *The Equation Balancer* (*download* a partir de <http://ourworld.compuserve.com/homepages/RayLec/atoms.htm>) incluída no programa *Atoms, Symbols and equations* v 2.4.(figura 2.3).

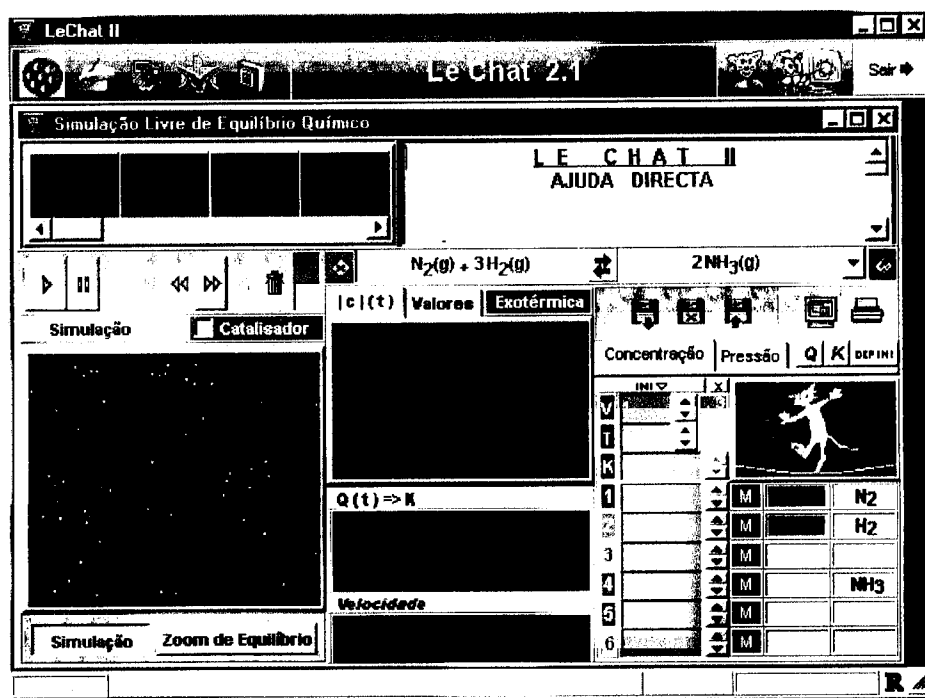


Figura 2.1- Imagem de entrada do programa *Le Chat II*.

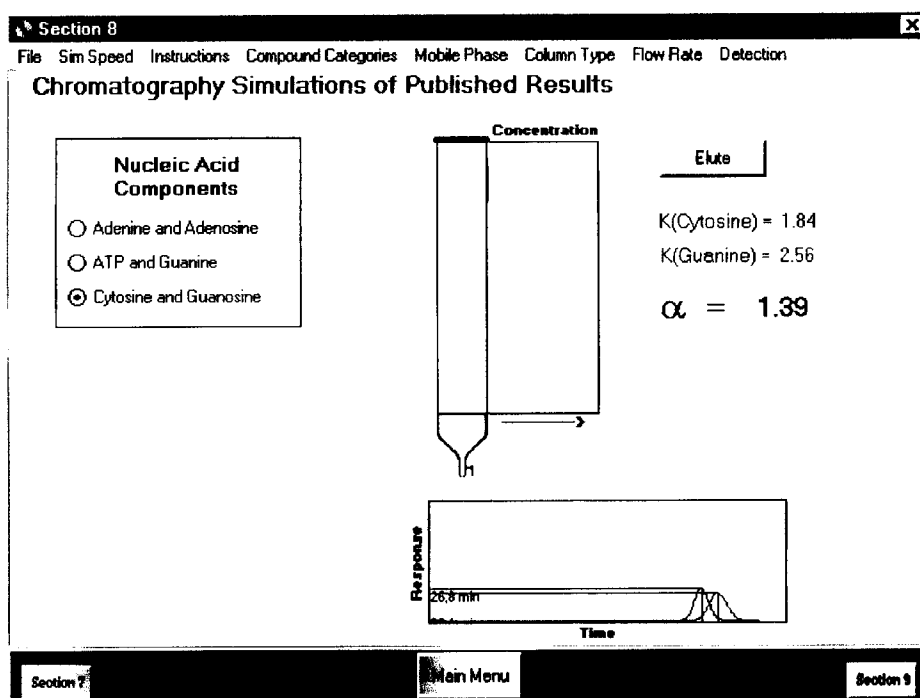


Figura 2.2- Imagem (do programa *Chemland*) de simulação relativa à separação, por cromatografia líquida, das bases citosina e gaunina.

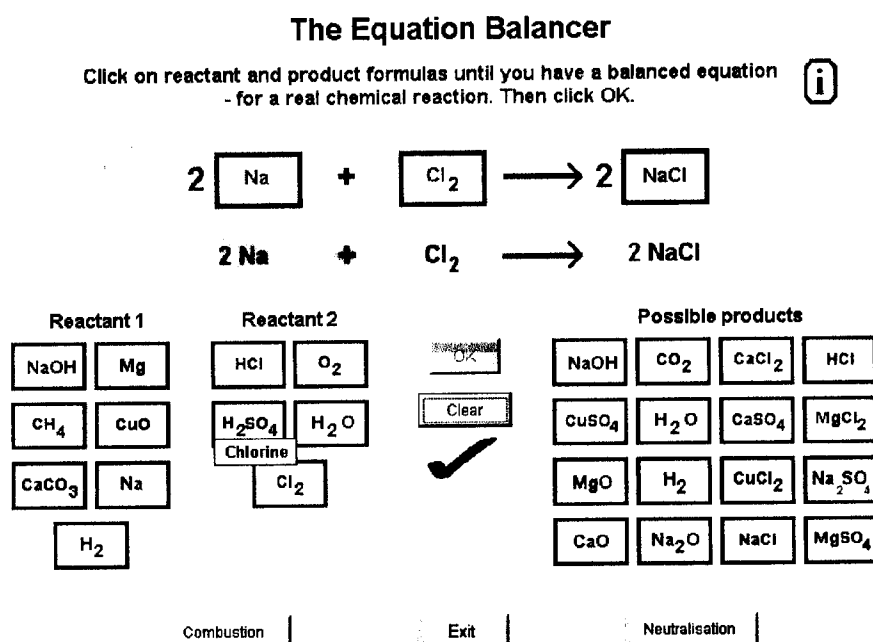


Figura 2.3- Imagem de *The Equation Balancer*, simulação do acerto de equações químicas, incluída no programa *Atoms, Symbols and Equations* v 2.4.

2.2.2. Revisão de alguns estudos sobre simulações computacionais em Química

Friedler, Nachmias e Linn (1990) investigaram, nos Estados Unidos da América, o impacto dum *MBL* (*microcomputer based laboratory*) relativamente à observação e à previsão relativamente a problemas envolvendo os conceitos de calor e de temperatura. O objectivo principal era conceber um módulo capaz de fomentar o raciocínio e posteriormente avaliá-lo.

No estudo estiveram envolvidos 110 alunos de 8º ano de escolaridade, distribuídos da seguinte forma: em 2 turmas enfatizou-se a capacidade de observação e noutras 2 turmas a capacidade de previsão. Para o MBL, dispunham de um computador por 2 alunos, sensores de temperatura e *software* próprio, sendo esta instrução aplicada durante um semestre (29 aulas).

Algumas das questões a que os autores que pretendiam obter resposta eram:

- 1- Como é que os alunos adquirem as capacidades de observação e de previsão a partir de um currículo MBL?
- 2- As exigências do grupo de observação são diferentes das do grupo de previsão?
- 3- A aprendizagem das capacidades de observação e de previsão ajudam os alunos noutras capacidades de raciocínio (planeamento, controlo de variáveis, *etc*)?

A avaliação da instrução constou genericamente dos seguintes instrumentos:

- Teste final “de descoberta”.

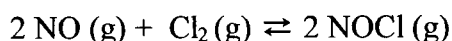
- Teste de raciocínio científico.
- Teste de conhecimento sobre a matéria.
- Observação na sala de aula.
- Entrevistas.

Os resultados mostraram que o grupo de alunos envolvidos na observação aprenderam a fazer observações mais pormenorizadas, descrevendo os passos iniciais, alterações durante a experiência e interpretação de resultados. O grupo de alunos envolvido na previsão era capaz de fazer previsões em mais pormenor e de justificá-las com base nas suas experiências anteriores.

Os dois grupos obtiveram resultados semelhantes em testes de conhecimentos e em mestria de outras capacidades de raciocínio científico.

Hameed, Hackling e Garnett (1993), na Austrália, utilizaram uma “instrução assistida por computador” (IAC) para “desafiar” dificuldades previamente identificadas sobre equilíbrio químico. A IAC utilizou simulações para criar conflito cognitivo nos alunos e para promover concepções científicas.

O estudo envolveu 30 alunos do 12º ano nas Maldivas, sendo as CAs obtidas por entrevista, teste de escolha múltipla, tendo escolhido, para o efeito, o seguinte equilíbrio, desconhecido dos alunos:



Após instrução *normal*, sobre equilíbrio químico e teste de papel e lápis, os alunos tiveram 2 aulas com IAC, de 90 minutos cada, sendo posteriormente realizado novo teste.

Notou-se, após a IAC, de um modo geral, um efeito positivo (que variou entre 19% e 95% para diferentes dificuldades), que os autores referem como podendo ser imputáveis à IAC. Estes resultados foram, além disso, duradouros.

Referem, ainda, que os computadores têm claramente duas vantagens que os tornam particularmente úteis para a mudança conceptual:

- 1- A possibilidade de instrução individualizada.
- 2- A possibilidade de simular muitos problemas científicos com eficácia (*e.g.*, o comportamento molecular pode ser observado).

Clavel e Duarte (1997) investigaram, em Portugal, a razão de os alunos terem a ideia (errada) de que a matéria é descontínua e estática. Para isso, utilizaram um *software hipermedia* com simulação cujas características essenciais eram:

- 1- As partículas em constante movimento.
- 2- Os espaços entre as partículas vazios.

O estudo envolveu 57 alunos de 8º ano, sendo 28 a turma de controlo e 29 a turma experimental, durante 3 meses.

A avaliação mostrou que os alunos da turma experimental demonstraram:

- 1- Maior aplicação da ideia de espaços vazios (nomeadamente para os estados líquido e gasoso).
- 2- Maior referência à existência de movimentos intrínsecos das moléculas.
- 3- Facilidade acrescida na aplicação de ideias submicroscópicas na explicação dos fenómenos apresentados.

Sanger, Phelps e Fienhold (2000), nos Estados Unidos da América, utilizaram uma animação no computador para melhor compreensão do colapso / esmagamento de uma lata contendo água em ebulição ao ser invertida sobre água fria ou quando é fechada (rolhada) e arrefecida.

O estudo envolveu 70 alunos do 1º ano de um curso superior de Química, que apresentaram diversas ideias erradas e/ou dificuldades:

- 1- Não interpretação do fenómeno a nível molecular, aplicando cegamente as leis dos gases.
- 2- As moléculas são capazes de mudar de forma e de tamanho.
- 3- A energia é uma forma de matéria ao nível macroscópico.
- 4- Não reconhecimento do vapor de água na lata.

Após aplicação da animação, verificou-se que os alunos eram capazes de explicar o fenómeno correctamente, mencionando a condensação do vapor de água (fazendo a pressão dentro da lata diminuir), o que leva ao seu colapso por diferença de pressão relativamente ao exterior.

Na tabela 2.1 estão sintetizadas as características essenciais dos estudos referidos. Estes estudos são só uma amostra da vasta investigação que existe neste domínio, mas que não são,

contudo, muito abundantes na temática das ligações intermoleculares, nomeadamente no que se refere a simulações computacionais.

Conteúdos	Dificuldades	Questão central	Amostra e metodologia	Resultados após aplicação	Autores
Calor e temperatura	Aspectos não previstos no estudo.	Avaliar o impacto de um MBL na aprendizagem dos conceitos de calor e de temperatura.	110 alunos de turmas de 8º ano. MBL para um par de alunos.	Melhorias ao nível da observação e da previsão, assim como na capacidade de resolução de problemas.	Friedler, Nachmias e Linn, 1990.
Equilíbrio químico	Foram detectadas 16 dificuldades.	Em que medida as dificuldades que os alunos apresentavam sobre equilíbrio químico foram alteradas por uma IAC baseada num modelo de mudança conceptual.	30 alunos de 12º ano com entrevista e teste de escolha múltipla para detectar dificuldades. Simulação para criar o conflito cognitivo com respectivo <i>feedback</i> .	Efeitos positivos que variaram de 19% a 95 %. Os melhores resultados foram nos casos onde, além do conflito cognitivo, se utilizaram gráficos.	Hameed, Hackling e Garnett, 1993.
Estrutura da matéria	Concepção de matéria contínua e estática.	Os alunos concebem a matéria como contínua e estática, referindo que esta concepção é muito baseada na teoria cinética molecular.	57 alunos de 8º ano. <i>Software hipermedia</i> com simulação.	Aplicação da ideia de espaços intermoleculares. Referência à existência de movimentos moleculares. Maior facilidade na aplicação de ideias submicroscópicas na explicação dos fenómenos apresentados.	Clavel e Duarte, 1997.
Teoria cinética molecular; leis dos gases	Moléculas capazes de mudar de forma e tamanho. A energia é uma forma de matéria ao nível macroscópico.	A razão pela qual colapsa uma lata aberta aquecida contendo vapor de água quando é rolhada e arrefecida ou quando se inverte sobre água fria.	70 alunos (1º ano, 2º semestre dum curso superior de Química). Simulação em computador.	Melhor explicação do fenómeno baseado na diminuição da pressão entre a lata e o exterior, que a faz colapsar.	Sanger, Phelps e Fienhold, 2000.

Tabela 2.1- Resumo de alguns estudos envolvendo simulações computacionais em Química.

2.3. Simulações *on-line*

O desenvolvimento das TIC e da sociedade da informação trouxe consigo as redes de computadores (e de sistemas de comunicação em geral) que, desta forma, passam a debitar cada vez maiores quantidades de informação.

Neste contexto, a *Internet* desempenha um papel primordial no processo educativo. Não é, pois, de admirar, que escolas e universidades a utilizem para divulgar os seus cursos, para desenvolverem materiais de apoio ao ensino (testes, vídeos, apontamentos, *etc*) e, até, para angariar novos alunos. No anexo I indicam-se alguns endereços (com descrição sumária) na *Web*, dedicados ao ensino e aprendizagem de Química.

Relativamente ao processo de ensino / aprendizagem, poderão ser enumerados alguns benefícios trazidos pela *Web*:

- O acesso à informação é praticamente ilimitado: tanto se pode visitar um museu virtual em Nova Iorque, como obter informação mais actualizada sobre os efeitos ambientais relativos à camada do ozono.
- A variedade de recursos é enorme: gráficos, imagem, texto, som, vídeo, *etc*.
- A possibilidade de pesquisa e descoberta, que contribui não só para alargar o leque de conhecimentos do aluno, como igualmente para aumentar a sua auto-estima.
- As possibilidades de comunicação via correio electrónico (*email*) e *chat* (“conversar” electronicamente com outros usando o teclado do computador).
- A igualdade de oportunidades para todos.
- A participação na sociedade da informação.
- Uma maior credibilidade do professor perante os alunos, na medida em que estes podem estudar matérias anteriormente leccionadas, de modo tradicional.

Na *Web* existe praticamente informação sobre tudo o que se pretenda, em qualquer local e a qualquer hora. O papel do professor é essencial no sentido de “filtrar” muita dessa informação que pode estar “distorcida” ou até cientificamente incorrecta, sendo, cada vez mais, um orientador que ajude os seus alunos a saber procurar e a seleccionar a melhor informação.

Para o ensino e aprendizagem de Química, existem variadíssimos *sites* com simulações interactivas e em tempo real. A título de exemplo, apresentam-se alguns endereços:

- <http://www.howstuffworks.com/framed.htm?parent=atom.htm&url=http://micro.magnet.fsu.edu/electromag/java/rutherford/>, simulação da experiência de Rutherford (figura 2.4).
- <http://www.phy.ntnu.edu.tw/java/image/rgbColor.html>, que permite misturar as cores primárias da luz (figura 2.5).
- <http://jersey.uoregon.edu/vlab/Piston/index.html>, simulação do comportamento de um gás ideal (figura 2.6).

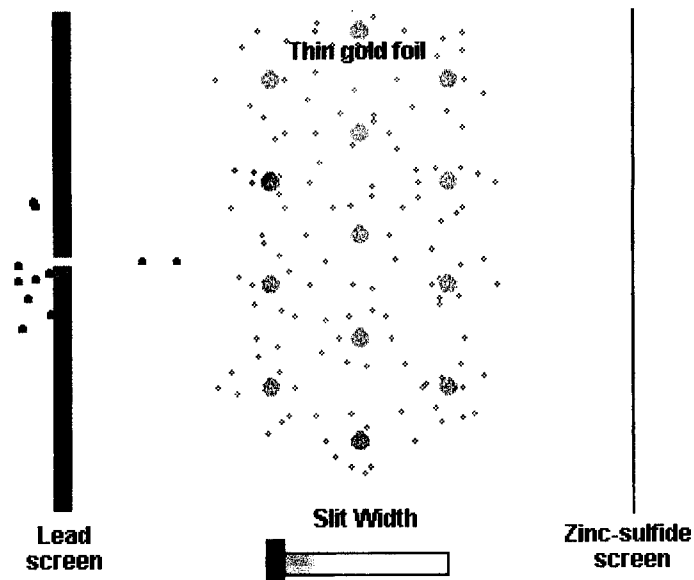


Figura 2.4- Imagem de simulação *on-line* da experiência de Rutherford.

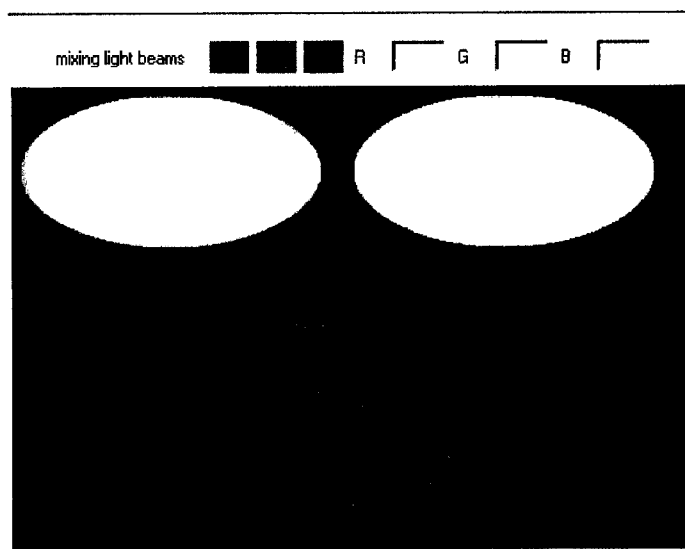


Figura 2.5- Imagem principal de simulação *on-line* que permite misturar as cores primárias da luz.

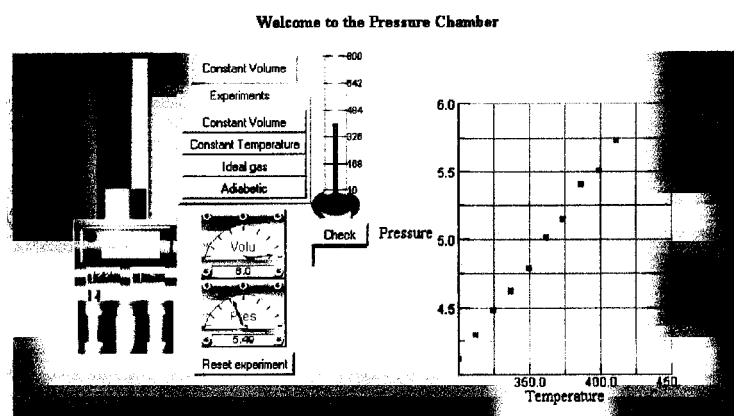


Figura 2.6- Imagem de simulação *on-line* da relação entre pressão e temperatura, a volume constante, para um gás ideal.

2.3.1. Vantagens das simulações *on-line*

As simulações *on-line* apresentam algumas das características já mencionadas para as simulações e para as TIC em sentido lato: interactividade, eliminação dos custos das experiências com laboratório sempre limpo e arrumado, possibilidade de repetição sempre que se quiser e sem receio de errar, visualização de fenómenos a nível microscópico a maiores ou menores velocidades, *etc.* Acrescente-se, ainda, a vantagem das simulações na *Web* serem tipicamente de livre acesso, dado que não implica, por parte do utilizador, qualquer pagamento (além do custo da utilização da rede) para delas poder usufruir. Finalmente, há a referir que não ocupam espaço no disco duro do computador do utilizador, não precisam de ser instaladas nem de se fazer o seu *download*, dado que estão *on-line*.

2.3.2. Constrangimentos das simulações *on-line*

Apesar de todas as virtudes das simulações *on-line*, alguma frustração e desencanto no que diz respeito ao seu uso em contexto pedagógico têm sido apontados por diversos autores (Miller e Olson, 1994; Donovan e Nakhleh, 2001; Paiva, 2002):

- Uma certa “fobia” dos professores por estes materiais devido a práticas e rotinas enraizadas há muito, o que dificulta a sua implementação.
- Pouca consciência e desconhecimento até das suas potencialidades.
- A inexistência da igualdade que se reclama; a implementação das TIC não é, de modo algum, uniforme, havendo populações mais favorecidas do que outras. Muitos alunos há que não têm sequer computador, o que poderá dificultar a sua relação com os mesmos.

- Experiência insuficiente com as TIC, quer em termos de formação inicial dos professores, quer em termos de formação contínua.
- *Stress* dos professores na sua actividade diária.

Convém sempre ter em mente que as simulações são uma aproximação à realidade, não são a realidade propriamente dita, devendo esta ideia estar sempre presente quando se utilizam simulações (*on-line* ou não), de modo a não criar ideias erradas nos alunos que aprendem manipulando essas mesmas simulações.

Frisa-se, pois, que as simulações para o ensino e aprendizagem de Química são, em si próprias e de um modo geral, um bem. A sua eficácia pedagógica, contudo, depende muito dos contextos e dos protagonistas.

Feitas as contas, o balanço global é, porém, claramente positivo. E se já o é hoje, muito mais será amanhã quando a massificação da largura de banda deixar de ser uma miragem, nomeadamente com a *ADSL* (*Assymetric Digital Subscriber Line*), alargamento de banda via linha telefónica. Esta foi a razão de se ter optado por construir módulos *on-line* (ver adiante 4.2. e 5.2.).



Capítulo 3

Forças intermoleculares

3- Forças intermoleculares

3.1. Definição

As forças que se estabelecem *entre* moléculas são designadas *forças intermoleculares*. Tal como as *forças intramoleculares* (mais conhecidas por covalentes, entre átomos *dentro* de uma molécula), são de natureza electrostática (repulsões entre electrões, repulsões entre núcleos e atracções entre núcleos e electrões). A figura seguinte ilustra a diferença entre forças intermoleculares e intramoleculares.

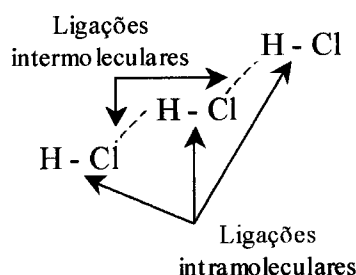
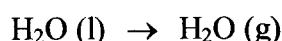
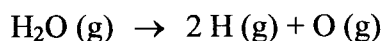


Figura 3.1- Ligações intramoleculares vs ligações intermoleculares em moléculas de HCl.

No entanto, as ligações intramoleculares são, de um modo geral, mais fortes que as ligações intermoleculares. Por exemplo, para se conseguir separar, a 100° C, uma mole de moléculas de água líquida, fenómeno representado pela equação



é necessária uma energia de 41 kJ. Entretanto, a separação de uma mole de moléculas de vapor de água nos seus elementos, representada por



exige a energia de 930 kJ (Gil, 2001).

3.2. Dipolo eléctrico

Qualquer que seja o tipo de ligação intermolecular, está sempre presente o conceito de dipolo eléctrico (Gil, 2001), que poderá ser *permanente*, caso de moléculas polares (*e.g.*, HCl) ou que tenha que ser formado (*instantâneo*), como é o caso de moléculas apolares (O₂, N₂, CH₄, *etc*).

Um dipolo eléctrico pode ser definido como um conjunto de cargas eléctricas pontuais, q_A e q_B , os pólos, separadas entre si a uma distância r (Atkins, 1998). Uma medida quantitativa da polaridade de um dipolo é dada pelo momento de dipolo (ou momento dipolar), μ , representado por um vector com sentido da carga negativa para a carga positiva (figura 3.2) e de intensidade

$$\mu = q \times r \quad (3.1)$$

Embora no sistema internacional de unidades (SI) as unidades de μ sejam C m (coulomb metro), é vulgar, no entanto, exprimi-las em D (debye), sendo $1 \text{ D} = 3,33564 \times 10^{-30} \text{ C m}$. C é a unidade SI para carga eléctrica.

Numa molécula, a existência de um dipolo eléctrico é resultante das diferentes electronegatividades dos átomos que participam na ligação química: os electrões da ligação são mais fortemente atraídos pelo átomo mais electronegativo. Deste modo, os electrões estão mais deslocados na direcção de um dos átomos, gerando junto deste uma zona com excesso de electrões (um pólo δ^-) e, junto do outro, uma zona com deficiência de electrões (um pólo δ^+). Dipolos eléctricos existem, por exemplo, em moléculas como H_2O ou em HCl , como a seguir se representa (figura 3.3).

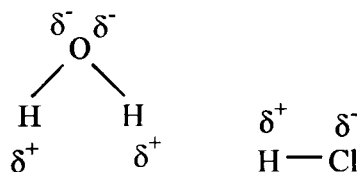


Figura 3.3- Esquema dos dipolos eléctricos em H_2O e HCl . Por simplificação, não estão representados os pares de electrões não ligantes.

Podem representar-se os dipolos de outra forma tendo em conta a nuvem electrónica das moléculas (figura 3.4).



Figura 3.4- Representação de dipolos eléctricos em a. H_2O ; b. HCl .

3.2.1. Interações entre dipolos

A interacção entre dipolos rege-se pelas leis da electrostática, nomeadamente pela lei de Coulomb. Considerando, no vazio, um sistema de cargas pontuais, q_A e q_B , à distância r (figura 3.2), a lei que descreve a intensidade da força electrostática, F , entre elas, descoberta

independentemente por Joseph Priestley e Charles Coulomb (Oxtoby e Hachtrieb, 1990), é dada por (Atkins, 1998; Chang, 2000):

$$F = \frac{q_A q_B}{4 \pi \epsilon_0 r^2} \quad (3. 2)$$

Nesta equação, $\epsilon_0 = 8,845 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$ é a permitividade no vazio.

Noutro meio (ar ou um líquido, *e.g.*), será dada por (Atkins, 2000)

$$F = \frac{q_A q_B}{4 \pi \epsilon r^2} \quad (3. 3)$$

onde ϵ é a permitividade do meio, definida como $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$, sendo ϵ_r a permitividade relativa (ou constante dieléctrica) do meio.

Por sua vez, a energia potencial eléctrica, V , do sistema é dada por (Chang, 2000):

$$V = \frac{q_A q_B}{4 \pi \epsilon_0 r} \quad (3. 4)$$

3.2.2. Moléculas polares e moléculas apolares

Relacionado com a existência de dipolos eléctricos numa molécula está o facto de haver moléculas polares e moléculas apolares. Se o momento de dipolo resultante, μ_{res} , da molécula for nulo, esta será apolar; se for não nulo, será polar.

Moléculas diatómicas heteronucleares são polares, havendo uma relação estreita entre μ e a diferença de electronegatividades, $\Delta\chi$, dos seus átomos (Atkins, 1998) dada por $\mu / D \approx \Delta\chi$. Por exemplo, HCl e HI apresentam valores μ / D 1,08 e 0,42, respectivamente.

Moléculas homonucleares podem ser apolares (*e.g.*, para H_2 , $\mu / D = 0$) e podem ser polares, apesar de não haver diferença de electronegatividade entre os seus átomos.

Um exemplo é a molécula de ozono, O_3 , que é polar devido à sua geometria (angular) e devido ao facto de a densidade electrónica ser menor no seu átomo central (figura 3.5). Nesta molécula, $(\mu / D) = 0,53$.

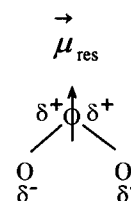


Figura 3.5- Interpretação da polaridade de O_3 . In Atkins, 1998.

Moléculas poliatómicas polares têm um momento de dipolo “global”, resultante, μ_{res} , não nulo: a combinação dos vários momentos de dipolo da molécula é diferente de zero (figura 3.6- a). Desta forma, a molécula pode ser reduzida a um dipolo (figura 3.6- b).

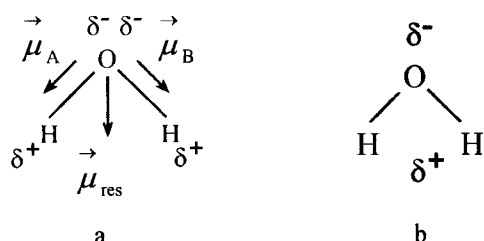


Figura 3.6- a. Momento de dipolo não nulo em H_2O . b. Representação simplificada de H_2O como molécula polar.

Moléculas poliatômicas podem ter ligações polares e serem, entretanto, apolares. É o caso de CH_4 , CCl_4 ou de CO_2 . Tal deve-se ao facto de o momento de dipolo global, $\vec{\mu}_{\text{res}}$, ser nulo. Na figura 3.7 ilustra-se para o caso de CO_2 : $\vec{\mu}_{\text{res}} = \vec{\mu}_A + \vec{\mu}_B = \vec{0}$.

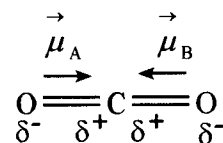


Figura 3.7- Devido à geometria da molécula de CO_2 , o seu momento de dipolo é nulo.

3.2.3. Momentos de dipolo induzidos

O momento de dipolo de uma molécula pode ser alterado por acção, por exemplo, de um campo eléctrico, provocando na primeira um dipolo induzido, μ^* , que é proporcional à intensidade do campo eléctrico, ε (Atkins, 1998):

$$\mu^* = \alpha \varepsilon \quad (3.5)$$

Nesta equação, α é uma constante de proporcionalidade designada por polarizabilidade.

Qualitativamente, a polarizabilidade é uma medida da maior ou menor facilidade com que a nuvem electrónica de um átomo ou de uma molécula pode ser distorcida por acção de um campo eléctrico externo (Chang, 2000), polarizando-se. De um modo geral, α é tanto maior quanto maior o número de electrões e quanto maior o tamanho da molécula. No SI, α tem as unidades $\text{C}^2 \text{m}^2 \text{J}^{-1}$. No entanto, é frequentemente expressa como volume de polarizabilidade (*polarizability volume*) α' :

$$\alpha' = \frac{\alpha}{4\pi \varepsilon_0} \quad (3.6)$$

Nesta expressão, ε_0 é o valor da permissividade no vazio e α' tem, então, as unidades m^3 . Por exemplo, para CCl_4 e H_2 , $\alpha' = 10,5 \times 10^{-30} \text{ m}^3$ e $0,819 \times 10^{-30} \text{ m}^3$, respectivamente.

3.3. Tipos de forças intermoleculares

São vários os tipos de ligações que se estabelecem entre as moléculas, podendo formar-se, genericamente, cinco grupos:

- 1- Dipolo instantâneo - dipolo induzido.
- 2- Dipolo permanente - dipolo permanente.
- 3- Dipolo permanente - dipolo induzido.
- 4- Ião - dipolo.
- 5- Ligação de hidrogénio.

A intensidade destas ligações é, de um modo geral, decrescente no sentido ligações ião - dipolo, ligações de hidrogénio, dipolo permanente - dipolo permanente, dipolo permanente - dipolo induzido, dipolo instantâneo - dipolo induzido. No entanto, esta intensidade depende de vários factores como sejam a constante dieléctrica do meio, a distância de separação entre as moléculas, a carga de iões envolvidos, os momentos de dipolo e a polarizabilidade molecular (Chang, 2000). Pode dar-se, por exemplo, o caso de uma ligação entre moléculas apolares (dipolo instantâneo - dipolo induzido) ser mais forte que uma ligação entre moléculas polares (dipolo permanente - dipolo permanente), como se descreve em 3.3.1. É o caso do iodo, que é sólido à temperatura ambiente e que remete para algum cuidado quando se diz “as ligações nesta molécula são fracas”, sendo ligações dipolo instantâneo - dipolo induzido. Como se discutirá adiante (3.4.1.), o estado físico de uma substância depende da intensidade das suas ligações intermoleculares.

Os três primeiros grupos são designados, no seu conjunto, por *forças de Van der Waals*. Estes cinco tipos de ligações serão caracterizadas sucintamente. Será igualmente caracterizada a ligação iónica (apesar de esta não ser uma ligação intermolecular) para comparação (equações e energias de ligação) com as ligações intermoleculares.

3.3.1. Ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido

As ligações dipolo instantâneo - dipolo induzido ocorrem em moléculas apolares, quer monoatómicas (He, Ne, Ar, *e.g.*), quer poliatómicas (CCl₄, CH₄, N₂, H₂, *e.g.*). Como os electrões nas moléculas estão constantemente em movimento, num determinado instante podem acumular-se numa dada zona da molécula: forma-se um *dipolo instantâneo*, que pode, noutro instante, ter orientação diferente. Esse dipolo, vai criar, em moléculas mais próximas, a formação de outros dipolos, designados *dipolos induzidos*: a zona do dipolo instantâneo com excesso de electrões vai repelir electrões de moléculas vizinhas; a parte com deficiência de electrões vai atrair electrões de moléculas vizinhas (Russo e Silver, 2000). Este processo prossegue entre as moléculas envolvidas. Entre as zonas de carga eléctrica contrária surgem

forças responsáveis pela ligação entre as moléculas. Estas forças são geralmente designadas por *forças de dispersão de London*. Na figura 3.8 representa-se globalmente o fenómeno.

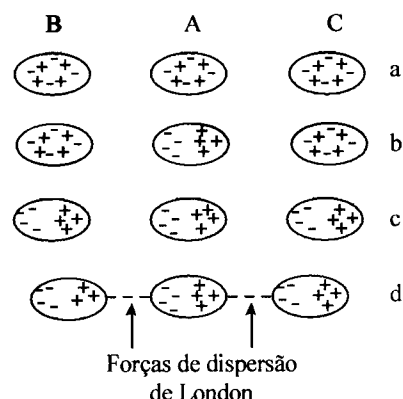


Figura 3.8- Representação esquemática da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido.

a. Moléculas apolares (A, B e C).

b. Polarização instantânea de A.

c. O dipolo instantâneo em A vai induzir dipolos em B e em C.

d. Entre zonas de sinal contrário surgem interacções responsáveis pela ligação intermolecular (---).

Em <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/index.html> pode ver-se de forma dinâmica este processo.

De um modo geral, a intensidade das forças de dispersão de London são proporcionais ao número de electrões e ao tamanho das moléculas e diminuem (no caso de isómeros) com o aumento de ramificação da cadeia.

No caso de a ligação se fazer entre moléculas iguais, a expressão da energia potencial é a seguinte (Chang, 2000)

$$V = - \frac{3}{4} \frac{\alpha^2 I}{r^6} \quad (3.7)$$

onde α é a polarizabilidade, I a primeira energia de ionização da molécula e r a distância entre as moléculas.

O efeito da polarizabilidade de uma molécula na sua energia potencial de interacção pode ser tal que, embora sendo, de um modo geral, este tipo de ligação intermolecular mais fraca que as restantes (ver tabela 3.3), pode acontecer que um composto apolar como, por exemplo, tetraclorometano, CCl_4 , apresente um ponto de ebulição consideravelmente superior ao do fluórmétano, CH_3F , polar, onde predominam ligações dipolo - dipolo: $76,5^\circ \text{ C}$ e $-141,8^\circ \text{ C}$, respectivamente (Chang, 2000). Em 3.4.1. discutir-se-á a relação entre o ponto de ebulição de uma molécula e a intensidade das forças intermoleculares.

Sendo a ligação entre moléculas diferentes, A e B, a energia potencial é dada pela equação seguinte, equação de London (Atkins, 1998)

$$V = - \frac{3}{2} \frac{I_A I_B}{I_A + I_B} \frac{\alpha_A \alpha_B}{r^6} \quad (3.8)$$

Nesta expressão

- I_A e I_B são as primeiras energias de ionização de A e B, respectivamente.
- α_A e α_B as polarizabilidades de A e B, respectivamente.
- r é a distância entre A e B.

A equação anterior mostra a dependência da energia potencial relativamente a r^6 : a energia potencial sofre uma redução drástica quando a distância entre as moléculas aumenta.

3.3.2. Ligação dipolo permanente - dipolo permanente

Este tipo de ligação ocorre entre moléculas polares, ou seja, com momento de dipolo (μ) não nulo. São igualmente designadas por ligações dipolo - dipolo e ocorrem, por exemplo, em H_2S , HCl e CH_3COCH_3 . A interacção ocorre entre os pólos de sinal contrário nas moléculas (figura 3.9).

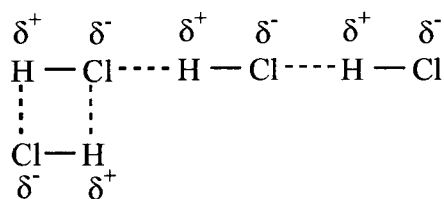


Figura 3.9- Representação de interacções (---) entre moléculas de HCl .

A energia potencial da interacção entre dipolos depende da sua orientação relativa (Atkins, 1998).

Considerando dois dipolos, A e B, à distância r com a orientação da figura 3.10, a expressão da energia potencial é dada por (Chang, 2000)

$$V = -\frac{2\mu_A\mu_B}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (3.9)$$

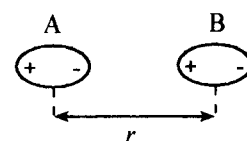


Figura 3.10- Representação da orientação de dois dipolos permanentes.

onde μ_A e μ_B são os momentos de dipolo de A e B, respectivamente, ϵ_0 a permissividade no vazio e r a distância entre os dipolos.

Com uma orientação semelhante à da figura 3.11, a energia potencial é dada por (Chang, 2000)

$$V = -\frac{\mu_A\mu_B}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (3.10)$$

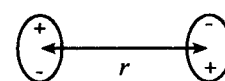


Figura 3.11- Representação da orientação de dois dipolos permanentes.

Para um sistema de dipolos dispostos paralelamente (figura 3.12), a energia potencial é dada por (Atkins, 1998)

$$V = \frac{\mu_A \mu_B (1 - 3 \cos^2 \theta)}{4 \pi \epsilon_0 r^3} \quad (3.11)$$

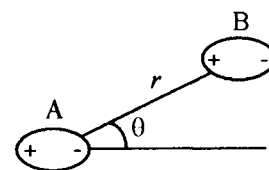


Figura 3.12- Orientação paralela de dois dipolos permanentes.

sendo θ o ângulo definido nas condições da figura.

Em sistemas macroscópicos, onde todas as orientações dos dipolos são possíveis, a energia potencial (média) é dada por (Atkins, 1998; Chang, 2000)

$$V = -\frac{2}{3} \frac{\mu_a^2 \mu_b^2}{(4 \pi \epsilon_0)^2 r^6} \frac{1}{kT} \quad (3.12)$$

Nesta equação, $k = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Na mesma evidencia-se a dependência da energia potencial relativamente a r^6 : tal como na equação 3.8, há uma redução drástica da energia potencial quando a distância entre as moléculas aumenta. Há, igualmente, a destacar a dependência relativamente ao inverso de T , dado que, a temperaturas superiores, a energia cinética média das moléculas é maior, tornando-se desfavorável à orientação dos dipolos para interacção atractiva (Chang, 2000).

3.3.3. Ligação dipolo permanente - dipolo induzido

Esta ligação pode ser definida como a ligação entre uma molécula polar (*e.g.*, H_2O) e uma molécula apolar (*e.g.*, O_2).

A aproximação de uma molécula polar (um dipolo eléctrico permanente) provoca uma distorção da nuvem electrónica na molécula apolar, induzindo nesta última um dipolo. O dipolo induzido pode, então, interagir com o dipolo permanente, estabelecendo-se interacção entre eles (figura 3.13)

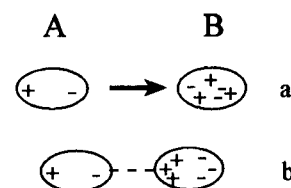


Figura 3.13- a. Uma molécula polar (A) induz um dipolo numa molécula apolar (B). b. Entre estes surge interacção responsável pela ligação (---).

É assim que se explica, por exemplo, a, embora pequena, solubilidade do oxigénio (O_2) em água, essencial para a vida de muitos organismos nesse meio (peixes, por exemplo). Estas interacções são geralmente fracas, o que explica a não miscibilidade e/ou a pequena solubilidade de substâncias apolares em solventes polares.

A energia potencial para um sistema dipolo permanente - dipolo induzido separados à distância r é dada por (Atkins, 1998; Chang, 2000)

$$V = -\frac{\alpha \mu^2}{4\pi \epsilon_0 r^6} \quad (3.13)$$

onde α é a polarizabilidade da molécula apolar e μ o momento de dipolo da molécula polar.

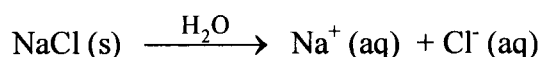
Um ião pode, de forma semelhante, induzir um dipolo numa molécula apolar. É o caso, por exemplo, de $\text{Na}^+ - \text{C}_6\text{H}_6$. Neste caso, a energia potencial é dada por (Chang, 2000)

$$V = -\frac{1}{2} \frac{\alpha q^2}{4\pi \epsilon_0 r^4} \quad (3.14)$$

sendo α a polarizabilidade da molécula, q a carga do ião, ϵ_0 a permissividade no vácuo e r a distância entre o ião e a molécula.

3.3.4. Ligação ião - dipolo

Este tipo de ligação refere-se à interacção entre iões e moléculas polares (dipolos permanentes), permitindo a dissolução de compostos iónicos em solventes polares. Um exemplo é a dissolução de NaCl em H_2O , representada pela equação



Tanto os catiões (Na^+) como os aniões (Cl^-) ligam-se às moléculas de água (solvatação) por forças ião - dipolo, sendo a interacção (de natureza electrostática) estabelecida entre o ião e o pólo de carga eléctrica contrária do dipolo (figura 3.14).



Figura 3.14- Representação de interacções ião - dipolo em $\text{NaCl} / \text{H}_2\text{O}$.

Estas interacções são tanto mais fortes quanto menor for o tamanho do ião (para iões com a mesma carga) e quanto maior for a carga, para iões de tamanho semelhante (Chang, 2000; Gil, 2001).

A ligação iónica é particularmente forte (ver, na tabela 3.3, os valores de energia de ligação), pelo que estas interacções devem ser vencidas para que, por exemplo, NaCl se dissolva em água. É a elevada constante dielétrica da água (tabela 3.1) que reduz as forças de atracção entre os iões, Na^+ e Cl^- , permitindo que estes se separem em solução (Chang, 2000).

Líquido	Constante dieléctrica
H ₂ SO ₄	101
H ₂ O	78,5
C ₃ H ₈ O ₃ (glicerol)	42,5
CH ₃ OH	32,6
C ₂ H ₅ OH	24,3
C ₆ H ₆	4,6
C ₂ H ₅ OC ₂ H ₅	4,3
CH ₃ COCH ₃	2,7
CS ₂	2,6

Tabela 3.1- Constantes dieléctricas de alguns líquidos puros, a 25° C. *In* Chang, 2000.

Em termos de energia potencial, para um arranjo em que o ião e o dipolo estejam no mesmo eixo à distância r (figura 3.15), a energia potencial é dada por (Chang, 2000)

$$V = - \frac{q \mu}{4\pi \epsilon_0 r^2} \tag{3.15}$$

onde q é a carga do ião e μ o momento de dipolo da molécula polar.

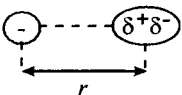


Figura 3.15- Representação de interação ião-dipolo.

3.3.5. Ligação de hidrogénio

A ligação (ou ponte) de hidrogénio pode ser considerada um caso particular da ligação dipolo - dipolo, ocorrendo em moléculas com uma constituição do tipo $A - H \cdots B$, onde A e B são muito electronegativos e B tem um par de electrões não ligantes (Chang, 2000). O hidrogénio faz de ligação ou ponte entre dois átomos muito electronegativos pertencentes a duas moléculas.

Este tipo de ligação é único na medida em que o hidrogénio possui apenas um electrão. Quando este participa numa ligação intramolecular com um átomo muito electronegativo, o núcleo de hidrogénio fica parcialmente desprotegido. Desta forma, H^+ pode interagir com outro átomo fortemente electronegativo de outra molécula (Chang, 2000). Na figura 3.16 representam-se ligações de hidrogénio em H_2O e em H_2O / NH_3 .

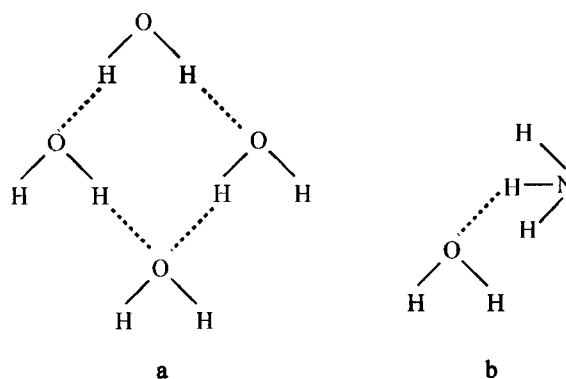


Figura 3.16- Representação de ligações de hidrogénio (...) em
a. H_2O ; b. $\text{H}_2\text{O} / \text{NH}_3$.

Em geral, esta ligação está limitada à participação de átomos de N, O e F, mas Cl pode igualmente participar em ligações de hidrogénio se pertencer a um composto iónico (Atkins, 1998). É de referir igualmente que podem ocorrer, numa molécula, ligações intramoleculares de hidrogénio (Chang, 2000). É o caso do ácido málico, onde a ligação se estabelece entre grupos $-\text{COOH}$ e grupos $-\text{COO}^-$ (figura 3.17).

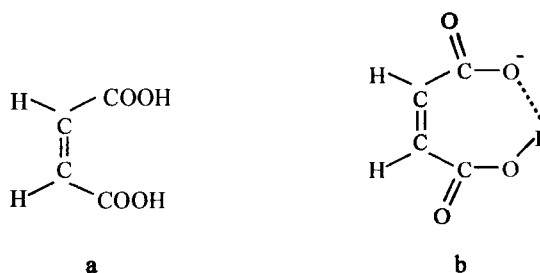


Figura 3.17- a. Fórmula de estrutura do ácido málico. b. Representação de ligações intramoleculares de hidrogénio no ácido málico.

Se houver ligações de hidrogénio entre moléculas, esta é predominante relativamente às outras ligações intermoleculares, dado ser mais intensa que qualquer uma delas. Comparando a energia de ligação média destas ligações com as restantes (tabela 3.2), é possível verificar-se que é, em média, cerca de dez vezes mais forte que a ligação dipolo permanente - dipolo induzido ou três vezes mais forte que a ligação dipolo - dipolo. (Dado que na ligação ião - dipolo participam iões e não apenas moléculas, esta não pode ser considerada uma ligação intermolecular típica.)

É a ligação de hidrogénio que explica que a água seja líquida nas condições normais de pressão e de temperatura, sendo igualmente responsável pelo seu elevado ponto de ebulição, como será abordado em 3.4.2.2.

Ocorrem igualmente ligações de hidrogénio em moléculas maiores, como álcoois, ácidos carboxílicos, em misturas de ácidos carboxílicos com água, de etanol com água, entre os pares

de bases adenina - timina e citosina - guanina na molécula de ácido desoxirribonucleico, ADN (figura 3.18), e nas proteínas (figura 3.19).

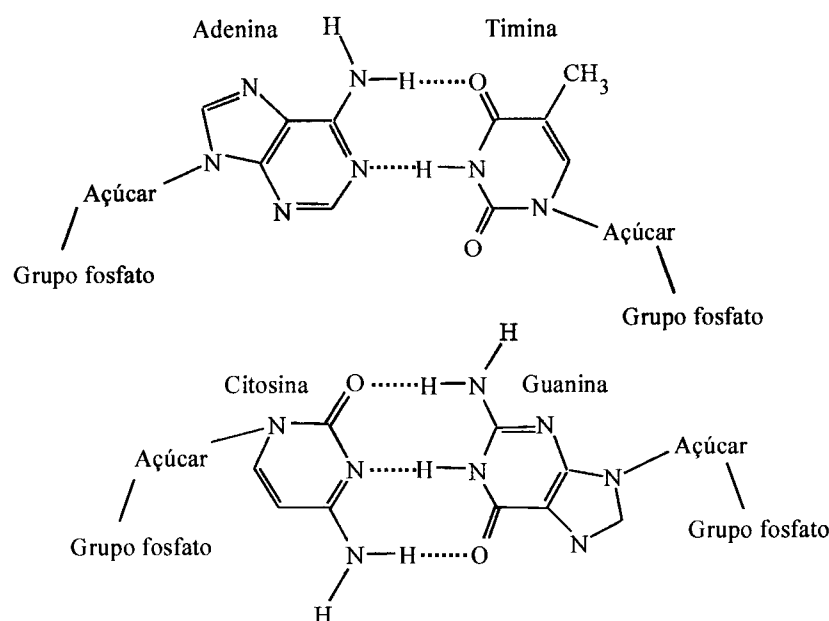


Figura 3.18- Representação de ligações de hidrogénio entre pares adenina - timina e entre pares citosina - guanina na molécula de ácido desoxirribonucleico (ADN).

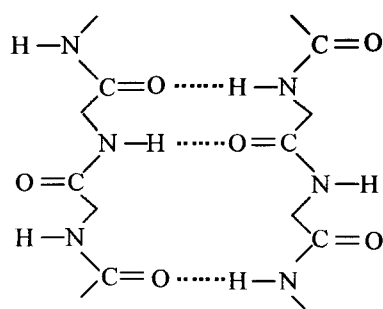


Figura 3.19- Representação de ligações de hidrogénio entre cadeias polipeptídicas numa proteína.

3.3.6. Ligação iónica

A ligação iónica corresponde à ligação entre iões, por exemplo entre Na^+ e Cl^- em NaCl . É igualmente devida a forças de natureza electrostática (atração entre cargas eléctricas de sinal contrário, repulsão entre cargas do mesmo sinal).

Para um arranjo de dois iões separados, no vazio, à distância r , entre si (figura 3.20), a energia potencial do sistema é dada por

$$V = - \frac{q_+ q_-}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (3.16)$$

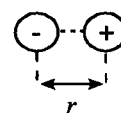


Figura 3.20- Interação iónica (---).

onde q_+ e q_- são as cargas dos iões respectivos, r a distância entre eles e ϵ_0 a permissividade no vazio.

Para o caso da interacção entre Na^+ e Cl^- , a energia potencial devida às forças de atracção é dada por (Chang, 2000)

$$V = - \frac{q_{\text{Na}^+} q_{\text{Cl}^-}}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (3.17)$$

sendo q_{Na^+} e q_{Cl^-} as cargas de Na^+ e Cl^- , respectivamente.

Tendo em conta as interacções relativas às repulsões interelectrónicas e internucleares, a energia potencial deste par é dada por (Chang)

$$V_0 = - \frac{q_{\text{Na}^+} q_{\text{Cl}^-}}{4\pi \epsilon_0 r_e} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad (3.18)$$

onde V_0 se refere à energia necessária para romper a ligação mais estável à distância r_e e n é um número entre 8 e 12.

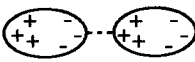
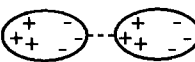
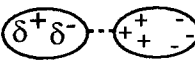
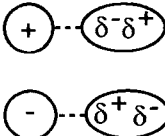
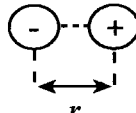
A tabela 3.2 resume as características dos vários tipos de forças, nela se incluindo igualmente a ligação iónica (não sendo esta última uma ligação intermolecular).

3.4. Importância das forças intermoleculares

O estado físico de uma substância depende essencialmente do balanço entre a intensidade das forças intermoleculares (que tende a ordená-las) e os incessantes movimentos das moléculas (que tendem a criar desordem). Dependendo do balanço entre estes dois factores, assim a substância se apresenta no estado sólido, líquido ou gasoso. A intensidade dos movimentos, por sua vez, depende da temperatura, que determina igualmente o estado físico. De uma forma geral, a intensidade das forças intermoleculares influencia o estado físico da substância e os seus pontos de fusão e de ebulição (Gil, 2001).

3.4.1. Estados físicos

Substâncias muito semelhantes do ponto de vista de constituição química podem, devido à natureza e intensidade das forças intermoleculares, existir, nas mesmas condições, em estados físicos diferentes. É o caso de H_2S , que é um gás, e de H_2O , que é um líquido. Na primeira, as forças intermoleculares predominantes são dipolo - dipolo, enquanto na segunda são ligações de hidrogénio, mais fortes que as primeiras (em H_2O existem ligações de hidrogénio devido à grande electronegatividade do oxigénio, O).

Força intermolecular	Representação esquemática	Expressão da energia potencial	Exemplos	Energia de ligação ⁽¹⁾ / kJ mol ⁻¹
Dipolo instantâneo - - dipolo induzido		$V = - \frac{3}{4} \frac{\alpha^2 I}{r^6}$	Ne --- Ne CH ₄ --- CH ₄	4,0 – 40
Dipolo - dipolo		$V = - \frac{2}{3} \frac{\mu_a^2 \mu_b^2}{(4 \pi \epsilon_0)^2 r^6} \frac{1}{kT}$	HCl --- HCl SO ₂ --- SO ₂	0,50 – 15
Dipolo - dipolo induzido		$V = - \frac{\alpha \mu^2}{4 \pi \epsilon_0 r^6}$	HCl --- C ₆ H ₆ H ₂ O --- O ₂	0,40 – 4,0
Ião - dipolo		$V = - \frac{q \mu}{4 \pi \epsilon_0 r^2}$	Na ⁺ --- H ₂ O Cl ⁻ --- H ₂ O	5,0 – 60
Ligação de hidrogénio	A — H ... B	Não há expressão	H ₂ O ... H ₂ O HF ... HF	4,0 – 40
Ligação iónica		$V = - \frac{q_+ q_-}{4 \pi \epsilon_0 r}$	Na ⁺ --- Cl ⁻ Cu ²⁺ --- SO ₄ ²⁻	40 – 400

(1) Energia de rede no caso da ligação iónica. Os valores reais das energias de ligação dependem da distância de separação, da carga, momento de dipolo, polarizabilidade e da constante dieléctrica do meio.

Tabela 3.2- Resumo das características essenciais das diversas forças intermoleculares e da ligação iónica. Adaptado de Chang, 2000.

De forma semelhante, nas mesmas condições de temperatura e pressão, I₂ é um sólido, Br₂ é líquido, enquanto Cl₂ e F₂ são gases (note-se que estas moléculas são todas de halogéneos). A explicação reside no facto de as ligações intermoleculares (nestes casos, dipolo instantâneo - dipolo induzido, ou forças de dispersão) serem mais intensas no sentido F₂, Cl₂, Br₂ e I₂.

Líquidos onde as ligações intermoleculares sejam particularmente fortes são pouco voláteis e podem mesmo apresentar-se viscosos. É o caso, por exemplo, da glicerina (ou glicerol) que, devido à sua composição (figura 3.21), pode formar várias ligações de hidrogénio intermoleculares.

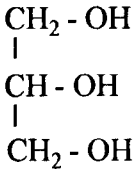


Figura 3.21- Fórmula de estrutura do glicerol.

3.4.2. Mudanças de estado físico

A mudança de estado físico para uma substância depende da intensidade das suas forças intermoleculares. Deste modo, os pontos de fusão e os pontos de ebulição de uma substância

serão tanto mais elevados quanto maior a intensidade das forças intermoleculares. Por exemplo, à pressão normal, a água, H_2O , entra em ebulição a cerca de 100°C , enquanto o éter dietílico, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OC}_2\text{H}_5$, entra em ebulição a cerca de 36°C .

3.4.2.1. Mudança de estado físico e forças de dispersão

Como já foi referido, a intensidade das forças de dispersão é proporcional ao número de electrões e ao tamanho das moléculas e diminui (no caso de isómeros) com o aumento de ramificação da cadeia.

É por isso que, por exemplo, o ponto de ebulição de I_2 é superior ao de Br_2 , ao de Cl_2 e de F_2 , todas moléculas de halogéneos. O mesmo se passa com o aumento nos pontos de fusão (gráfico 3.1).

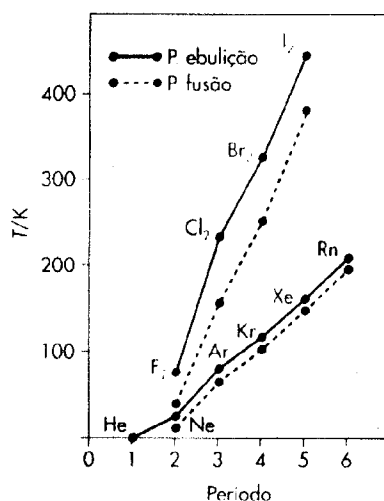


Gráfico 3.1- Relação entre pontos de ebulição e pontos de fusão de algumas moléculas com o seu tamanho e número de electrões. In Gil, 2001.

Da figura anterior, conclusões semelhantes se podem tirar quanto aos pontos de fusão e de ebulição no caso dos gases raros: o tamanho das moléculas e o número de electrões está a aumentar ao longo do período, tornando as moléculas mais *polarizáveis*.

Na tabela seguinte mostram-se alguns pontos de ebulição e estados físicos de alguns alcanos de cadeia linear, evidenciando-se a relação entre estes e o aumento da cadeia carbonada (e do número de electrões).

Nome do alcano	Fórmula molecular	Ponto de ebulição / °C	Estado físico (PTN)
Metano	CH ₄	- 162	Gás
Etano	C ₂ H ₆	- 89	Gás
Propano	C ₃ H ₈	- 42	Gás
Butano	C ₄ H ₁₀	- 0,5	Gás
Pentano	C ₅ H ₁₂	36	Líquido
Hexano	C ₆ H ₁₄	69	Líquido
Octano	C ₈ H ₁₈	126	Líquido
Icosano	C ₂₀ H ₄₂	344	Sólido

Tabela 3.3- Relação entre forças de dispersão, pontos de ebulição e estado físico nalguns alcanos. In Gil, 2001.

A forma da molécula pode igualmente influenciar a intensidade das forças de dispersão. Assim, por exemplo, o pentano (alcano linear) e o tetrametilmetano (alcano de cadeia ramificada) têm pontos de ebulição diferentes: 36° C para o primeiro e 10° C para o segundo (Gil, 2001). A explicação reside no facto de o primeiro ter uma nuvem molecular mais polarizável que o segundo, como se pode concluir a partir das respectivas fórmulas de estrutura. Na tabela 3.4 apresentam-se algumas propriedades características destes isómeros.

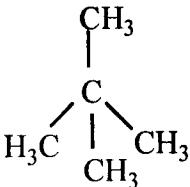
Fórmula molecular	C ₅ H ₁₂	C ₅ H ₁₂
Fórmula de estrutura	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	
Nome IUPAC	Pentano	Tetrametilmetano
Ponto de ebulição / °C	36	10

Tabela 3.4- Comparação entres pontos de ebulição de dois alcanos isómeros. In Gil, 2001.

As formas diferentes das moléculas vão fazer com que as interacções sejam diferentes nos dois casos: mais intensas no caso do isómero de cadeia linear e mais fracas no caso do isómero de cadeia ramificada (figura 3.22).



Figura 3.22- Interpretação dos pontos de ebulição de pentano (A) e de tetrametilmetano (B). Em A, os dipolos instantâneos tendem a interagir com maior intensidade que em B, devido ao facto de a forma da nuvem electrónica permitir uma maior superfície de contacto. Adaptado de Atkins e Jones, 2000.

3.4.2.2. Mudança de estado físico e ligações de hidrogénio

O aumento da intensidade das forças de dispersão e, consequentemente, o aumento do ponto de ebulição com o número de electrões em moléculas semelhantes ocorre igualmente nas séries

HCl, HBr, HI

H₂S, H₂Se, H₂Te

PH₃, AsH₃, SbH₃

como se pode constatar pelo gráfico seguinte.

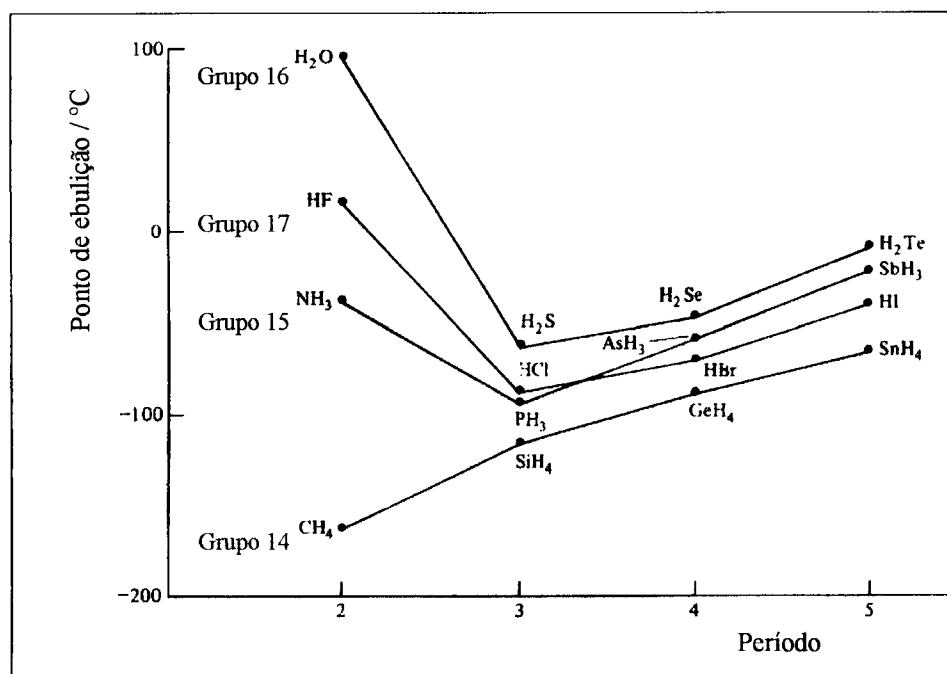


Gráfico 3.2- Efeito das ligações de hidrogénio sobre o ponto de ebulição de algumas moléculas. In Chang, 1991.

H₂O, HF e NH₃ têm, no entanto, pontos de ebulição “anormais”, superiores aos esperados, como se pode constatar no gráfico anterior. A explicação reside no facto de haver, nestas moléculas, ligações intermoleculares particularmente fortes, as ligações de hidrogénio, que fazem com que os seus pontos de ebulição sejam elevados quando comparados pontos de ebulição de moléculas semelhantes.

3.5. Repulsões e interações globais

Além de forças responsáveis pela atracção e consequente aproximação das moléculas (entre núcleos e electrões), há forças repulsivas que tendem a afastá-las. Caso isto não acontecesse, as moléculas fundir-se-iam (Chang, 2000). Esta hipotética fusão é evitada por forças entre electrões e por forças entre os núcleos que tendem a afastar as moléculas. A impossibilidade de fusão mais não é do que consequência do princípio da exclusão de Pauli que impede que dois electrões tenham o mesmo número quântico de *spin* e, por isso, não podem estar ao mesmo tempo no mesmo local. As moléculas vão, deste modo, distar umas das outras, tendo em conta um compromisso entre forças de atracção e forças de repulsão.

Analisando curvas de energia potencial, verifica-se que, à medida que as moléculas se aproximam, as repulsões interelectrónicas e internucleares aumentam significativamente (figura 3.23).

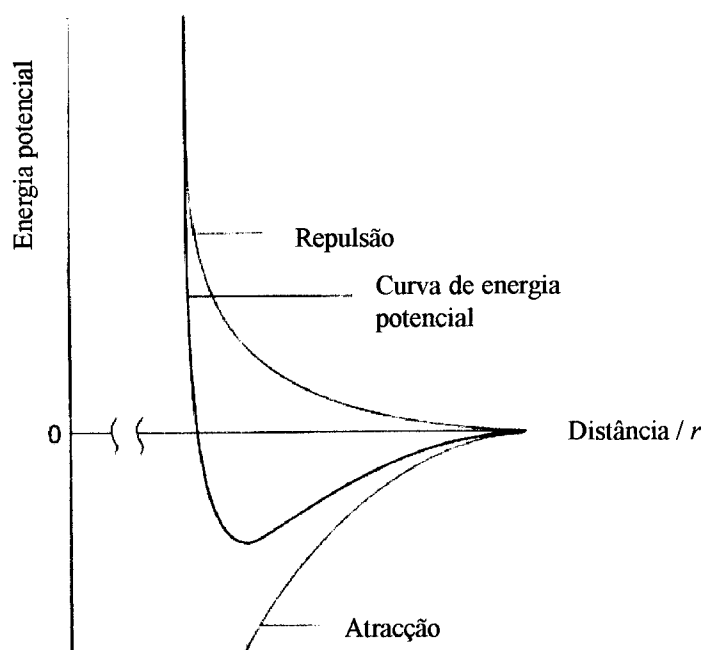


Figura 3.23- Representação genérica de uma curva de energia potencial para uma molécula. In Atkins, 1998.

Para sistemas não iónicos, a energia potencial é dada por

$$V = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} \quad (3.19)$$

Nesta equação, A e B são constantes para as moléculas envolvidas, A / r^6 representa o termo relacionado com as forças de atracção e B / r^{12} o termo relacionado com as forças de repulsão.

A equação anterior é normalmente expressa na forma de uma equação conhecida por potencial de Lennard-Jones:

$$V = 4\varepsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\}$$

(3.20)

Nesta equação, r_0 e ε representam a distância para a qual $V = 0$ e a profundidade do poço na curva de energia potencial, respectivamente (figura 3.24). O mínimo do poço, r_e , ocorre para $r_e = 2^{1/6} r_0$.

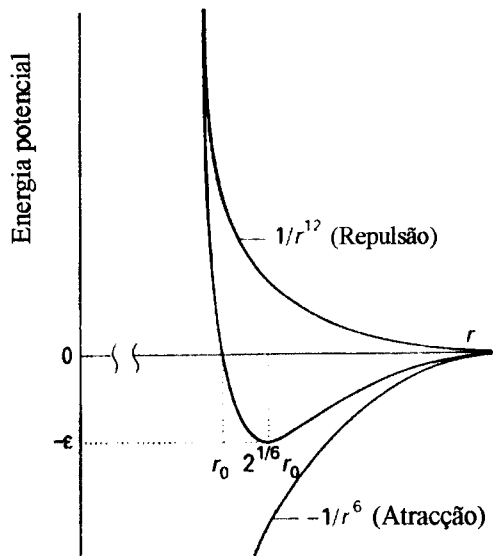


Figura 3.24- Relação entre os parâmetros ε e r_0 da curva de energia potencial de Lennard-Jones. Adaptado de Atkins, 1998.

O valor de r_0 dá uma ideia de quanto dois átomos separados se podem aproximar. É frequente ser expresso como o *raio de Van der Waals*, que corresponde a metade desta distância.

Na tabela 3.5 apresentam-se alguns valores para os parâmetros de Lennard-Jones para algumas moléculas.

Molécula	$(\varepsilon/k) / \text{K}$	r_0 / pm
Ar	111,8	362,3
Xe	214,0	426,0
F ₂	104,3	357,1
N ₂	91,85	391,9
C ₆ H ₆	377,5	617,4
CCl ₄	378,9	624,1

Tabela 3.5- Parâmetros de Lennard-Jones de algumas moléculas. In Atkins, 1998.

Capítulo 4

Caso I: Ensino da polaridade molecular no 9º ano

4- Caso I: Ensino da polaridade molecular no 9º ano

4.1. Contexto

4.1.1. Contexto científico - pedagógico

As simulações que foram desenvolvidas estão relacionadas com conteúdos a leccionar na componente de Química na disciplina Ciências Físico-Químicas 9º ano de escolaridade, estando integrados na unidade temática “Como a matéria é em mais pormenor” (Programa de Ciências Físico-Químicas, 1994).

Tradicionalmente, a Química é considerada uma disciplina difícil, com um insucesso geralmente elevado (Carter e Brickhouse, 1989; Martins *et al*, 2002). As dificuldades podem ser atribuídas a vários factores, desde o grau de abstracção envolvido em muitos conceitos até dificuldades inerentes a uma linguagem própria (Ayas e Demirbas, 1997). Nakhleh (1992) refere que a razão principal é a não compreensão de conceitos fundamentais nos quais assentam outros mais avançados. Sem a compreensão de conceitos elementares não é possível a compreensão de conceitos mais complexos, dependentes dos primeiros.

Devido à sua natureza dinâmica, a visualização e a compreensão de fenómenos químicos a nível microscópico são particularmente difíceis (Nurrenbern e Pickering, 1987; Smith e Metz, 1996; Sanger, 2000; Sanger, Phelps e Fienhold, 2000). Alguns destes fenómenos estão bastante estudados como sejam, por exemplo, o equilíbrio químico (Hameed, Hackling e Garnett 1993; Tyson, Treagust e Bucat, 1999), oxidação-redução (Ogude e Bradley, 1996; Sanger e Greenbowe, 1997), o conceito de reacção química (Barker, 1999; Ahtee e Varjola, 1998) ou calor vs temperatura (Caldeira e Martins, 1990; Harrison, Grayson e Treagust, 1999). Muitos destes fenómenos são, pela sua natureza, *dinâmicos*, não sendo, em geral, fácil visualizá-los com *representações estáticas* (livros, manuais, quadro preto, *etc*), por melhores que estas possam ser.

Por outro lado, é frequente os alunos resolverem facilmente problemas com base em fórmulas e algoritmos memorizados sem a compreensão dos fenómenos ao nível atómico / molecular (Nurrenbern e Pickering, 1987; Sawrey, 1990; Nakhleh, 1993; Nakhleh e Mitchell, 1993; Smith e Metz, 1996). Alunos há que memorizam esquemas de resolução de problemas, algoritmos e definições sem compreenderem verdadeiramente, na essência, muitos conceitos. Muitos alunos inclusive passam pelo sistema educativo com sucesso continuado durante anos a Química, sabendo resolver problemas sem a compreensão dos conceitos que lhes estão subjacentes (Nicoll, 2001). Nurrenbern e Pickering (1987) referem alunos que

resolvem problemas envolvendo cálculos estequiométricos e reagente limitante numa equação sem terem noção das alterações que ocorrem durante a reacção química, apresentando dificuldades quando solicitados a escrever uma equação química a partir de representações simbólicas de moléculas. Yaroch (1985), num estudo levado a cabo com alunos universitários, detectou dificuldades na escrita correcta dos produtos de reacção dada por $\text{N}_2 + 3 \text{H}_2 \rightarrow 2 \text{NH}_3$ quando lhes era proposta uma representação simbólica das moléculas. No entanto, os mesmos alunos acertavam correctamente equações químicas. Segundo Turner (1990), as dificuldades de muitos alunos em cursos de Química podem ser atribuídas ao facto de “nunca terem aprendido a visualizar sistemas químicos” (pp 955). Williamson e Abraham (1995) referem que “a falta da compreensão de conceitos químicos pode estar relacionada com a incapacidade dos alunos em construir modelos mentais completos que permitam visualizar ao nível microscópico” (pp 521). É sabido que a não compreensão de conteúdos poderá levar à desmotivação de um aluno, e que um aluno motivado tende a empenhar-se mais profundamente naquilo que está a realizar (Carvalho, 1999).

A polaridade molecular é um assunto cuja compreensão remete igualmente para o domínio do “mundo microscópico”. Recorde-se (ver 3.2.2.) que uma molécula é considerada polar se tiver um momento de dipolo resultante não nulo; caso contrário, é apolar. Por sua vez, o momento de dipolo depende da geometria da molécula e da existência ou não de ligações polares. Estas últimas, por sua vez, dependem da diferença de electronegatividade entre os átomos da ligação.

Entre as dificuldades e/ou ideias erradas identificadas na literatura relativas ao tema incluem-se:

- A polaridade depende apenas da geometria molecular, não interessando se as moléculas têm ou não ligações polares e a posição relativas destas (Furió e Catalayud, 1996).
- A polaridade depende apenas da diferença de electronegatividades entre os átomos envolvidos nas ligações (Peterson e Treagust, 1989; Furió e Catalayud, 1996; Birk e Kurtz, 1999).
- Uma molécula é polar apenas porque tem ligações polares (Birk e Kurtz, 1999).
- A polaridade determina a geometria da molécula (Peterson e Treagust, 1989; Nicoll, 2001).
- A polaridade não está associada à electronegatividade (Nicoll, 2001).

- A presença de electrões não ligantes determina a polaridade de uma molécula (Peterson, Treagust e Garnett, 1989).

Destes estudos há a destacar a pouca importância dada à geometria molecular na determinação da polaridade das moléculas, ignorando-se, praticamente, o seu efeito.

A polaridade de uma substância molecular pode ser avaliada aproximando desta um objecto electrizado. A electrização do objecto pode ocorrer de diversas formas (Aido *et al*, 1983), nomeadamente por:

- Contacto.
- Influência.
- Fricção.

A detecção de carga eléctrica pode ser feita com auxílio de um electróscópio, aparelho que contém, genericamente, duas folhas de ouro ligadas a um condutor isolado que termina num botão esférico (figura 4.1).

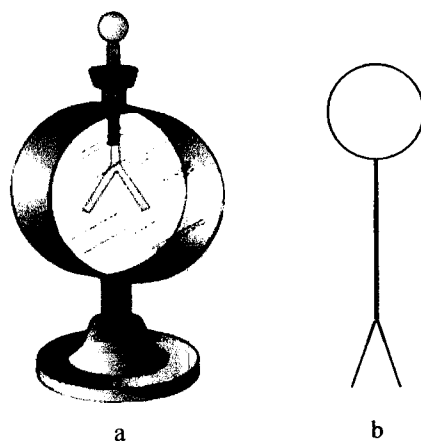
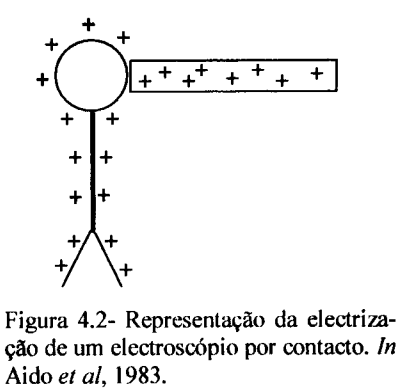


Figura 4.1- a. Electróscópio. b. Representação simplificada.

Não havendo carga eléctrica em excesso, as folhas do electróscópio mantêm-se juntas e a prumo. Quando a esfera for tocada por um objecto com excesso de carga negativa (uma régua de plástico friccionada por um pano de lã, por exemplo), parte dos electrões do objecto passam para a esfera do electróscópio e destas para as folhas, que, então, se afastam (repelem-se) em virtude de ficarem electrizadas com carga de sinal igual. Se a esfera for tocada por um objecto com excesso de carga positiva (uma barra de vidro friccionada com um pano de seda, por exemplo), passam electrões da esfera para o vidro e, por causa disso, das folhas para a esfera. Desta forma, as folhas ficam com excesso de carga positiva e, por isso, repelem-se, afastando-se (Tipler, 1995).

4.1.1.1. Electriza  o por contacto

Um objecto pode ser electrizado por ac  o de outro carregado electricamente por contacto directo.    o que acontece, por exemplo, quando, no bot  o de um electrosc  pio, se toca com um objecto com carga el  ctrica (figura 4.2): as folhas do electrosc  pio afastam-se indicando, assim, que tamb  m este foi electrizado (Aido *et al*, 1983).



4.1.1.2. Electriza  o por influ  ncia

Quando um objecto electrizado se aproxima de um condutor neutro isolado, pode haver a electriza  o do   ltimo sem haver transfer  ncia de electr  es entre eles. O objecto electrizado, o *indutor*, vai provocar no condutor, o *induzido*, uma polariza  o devido ao movimento de cargas (electr  es), ficando a parte do induzido mais pr  xima do indutor com carga el  ctrica de sinal contr  rio e de valor absoluto igual    do indutor (Aido *et al*, 1983). Este processo    designado por *induc  o electrost  tica* (figura 4.3- a e b).

   importante, contudo, referir que ap  s esta nova distribui  o da carga el  ctrica no induzido, n  o h   a sua electriza  o dado que continua a haver igual n  mero de cargas positivas e negativas.

Retirando o indutor, as cargas, no induzido, voltam    situa  o em que se encontravam antes da presen  a do primeiro.   , no entanto, poss  vel electrizar o induzido. Mantendo o indutor pr  ximo, liga-se o induzido    terra, escoando-se a carga el  ctrica de igual sinal da do indutor ficando o induzido com carga de sinal contr  rio do indutor (figura 4.3- c e d).

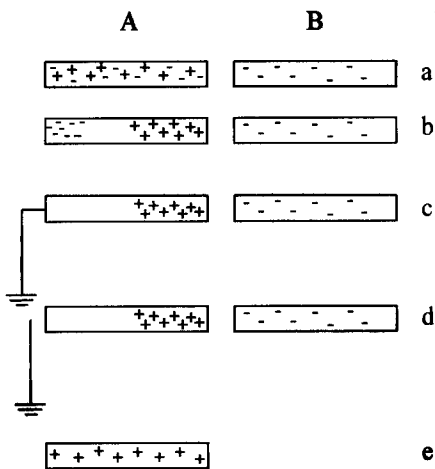


Figura 4.3- Electriza  o por influ  ncia.

a. Aproxima  o de um objecto electrizado, B, o indutor, a um objecto electricamente neutro, A, o induzido.

b. Induc  o electrost  tica, em A, por ac  o de B.

c. Liga  o de A    terra:

A fica com carga el  ctrica de sinal contr  rio da de B.

d. Corte da liga  o    terra. A mant  m carga el  ctrica de sinal contr  rio da de B.

e. Afastando-se B, a carga el  ctrica em A distribui-se uniformemente.

Adaptado de Aido *et al*, 1983.

Cortando, então, a ligação à terra e retirando-se o indutor, o induzido vai manter a carga que, entretanto, se distribui uniformemente (Aido *et al*, 1983; Tipler, 1995). Este processo de electrização é designado por electrização por influência.

4.1.1.3. Electrização por fricção

Em geral, quando dois objectos são postos em contacto, pode ocorrer entre eles transferência de electrões, havendo materiais com mais tendência a ganhar electrões e outros com tendência a perdê-los. Segundo a sua maior ou menor tendência a perder electrões, os diferentes materiais costumam ser ordenados em *séries triboeléctricas* (Aido *et al*, 1983; Villate, 1999). Na tabela seguinte apresenta-se uma série triboeléctrica.

Amianto
Pele de coelho
Lã
Chumbo
Seda
Alumínio
Papel
Algodão
Madeira
Âmbar
Níquel, Cobre
Borracha
Estanho, Prata
Acetato
Esferovite
PVC
Tabela 4.1- Série triboelétrica. <i>In</i> Villate, 1999.

Nestas séries, os materiais do topo da lista são os que maior tendência têm para perder electrões. Utilizando estes materiais para friccionar objectos, pode-se conseguir electrizá-los.

Assim, por fricção de um objecto de plástico (uma régua, por exemplo) com um pano de lã, parte dos electrões do pano passam para o plástico, ficando este com excesso de electrões e o pano com deficiência (figura 4.4).

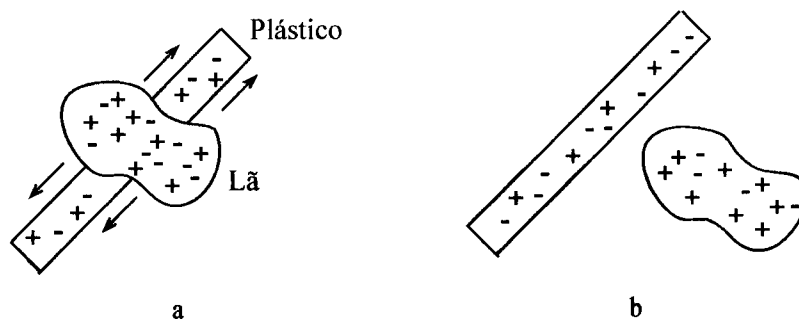


Figura 4.4- Friccionando um objecto de plástico com um pano de lã (a), passam electrões do pano para o plástico (b). Pode ver-se a simulação dinâmica do fenómeno em <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/interaccoes/index.html>.

Caso se friccionasse um objecto de vidro com um pano de seda, haveria passagem de electrões do vidro para o pano (figura 4.5).

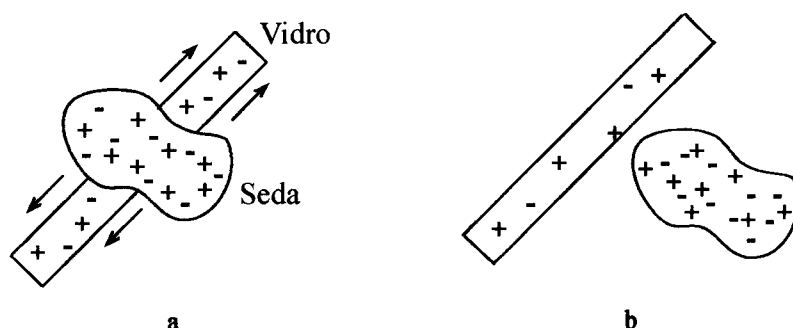


Figura 4.5- Friccionando um objecto de vidro com um pano de seda (a), passam electrões do vidro para a seda (b). Pode ver-se a simulação dinâmica do fenómeno em <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/interaccoes/index.html>.

Pode provar-se experimentalmente que, quando um objecto é friccionado com um dado material, o excesso de electrões com que o primeiro fica é igual à deficiência com que fica o segundo (Aido *et al*, 1983). A figura seguinte resume este processo.

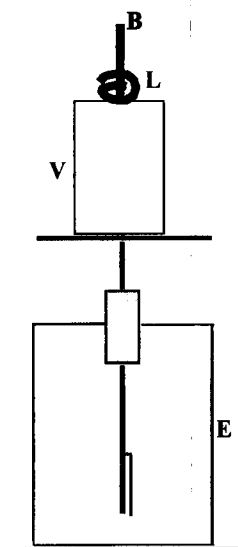


Figura 4.6- Friccionando uma barra, B, de poli(etileno) com um pano de lã, L, enrolado no interior de um vaso metálico, V, colocado sobre o prato de um electoscópio, E, as folhas deste afastam-se após se retirar a barra, sinal de que o pano ficou eletrizado. Introduzindo novamente a barra no pano de lã, as folhas caem, mostrando que o excesso de electrões da barra é igual à deficiência de electrões do pano. In Aido *et al*, 1983.

4.1.1.4. Teste experimental de polaridade molecular

Para se confirmar a polaridade de diversas moléculas, recorreu-se ao teste que consiste em aproximar um corpo electrizado a um fio dos diversos líquidos das moléculas contidos em buretas. Neste caso, foi utilizada uma régua de plástico que foi previamente friccionada com um pano de lã. Na figura 4.7 indica-se o esquema de montagem.

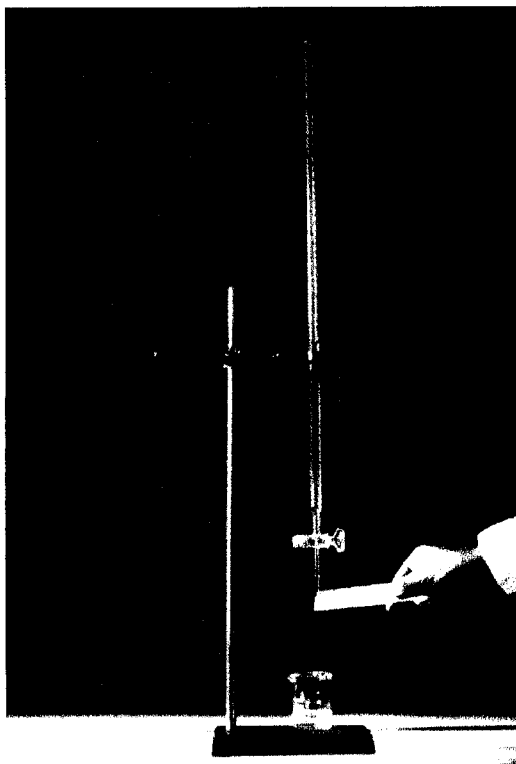


Figura 4.7- Esquema de montagem para testar a polaridade de diversas moléculas.

Na figura 4.8 mostra-se uma imagem de um dos vídeos, correspondente ao teste de polaridade com acetona.



Figura 4.8- Imagem retirada de vídeo do esquema de montagem para testar a polaridade da acetona.

Moléculas polares (por exemplo, a água) são atraídas (sofrem um *desvio*) em direcção ao objecto electrizado, enquanto moléculas apolares (por exemplo, benzeno) em geral não são.

Podem sê-lo, no entanto, com utilização de um campo magnético de intensidade adequada (Vermulapalli e Kukolich, 1996). Como as moléculas são apolares, podem adquirir um momento de dipolo induzido por acção, por exemplo, de uma diferença de potencial. No caso concreto do benzeno, para que esta molécula possa apresentar um desvio semelhante ao da água, a diferença de potencial deverá ser 3,5 vezes maior que a utilizada para a água (Vermulapalli e Kukolich, 1996).

A interpretação para o facto de uma molécula ser atraída por um objecto eletrizado reside no facto de estar polarizada, ter uma distribuição assimétrica de electrões, a qual pode ser permanente ou provocada, induzida. As moléculas vão ser atraídas pelos seus pólos: pelo pólo positivo se o objecto estiver com excesso de carga negativa; pelo pólo negativo se o objecto estiver com deficiência de carga negativa (ou excesso de carga positiva). Na figura seguinte ilustra-se para o caso da água, H_2O .

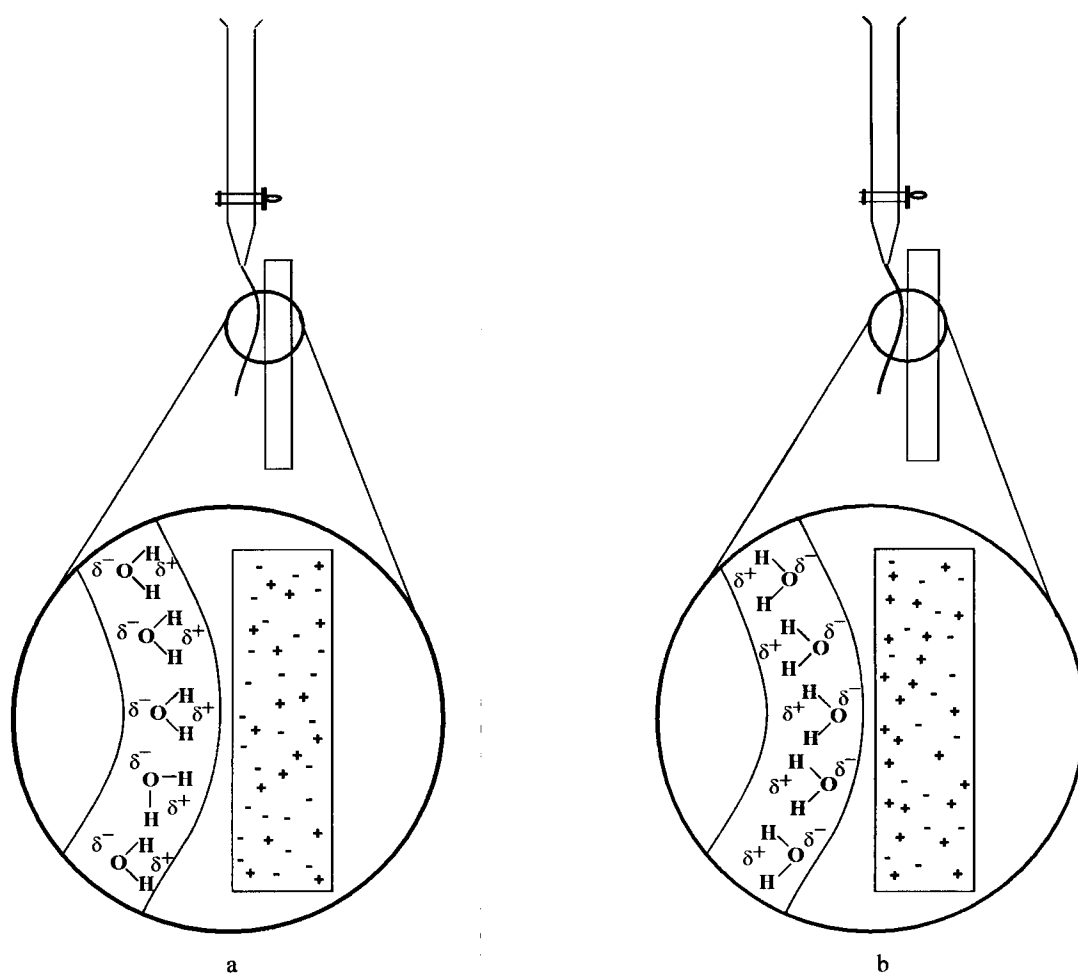


Figura 4.9- Interpretação do comportamento de H_2O relativamente a um objecto eletrizado: a. com excesso de electrões; b. com deficiência de electrões. Em <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/interaccoes/index.html> pode ver-se a simulação do fenómeno.

Uma molécula apolar não vai ser atraída pelo facto de não ser um dipolo eléctrico, apesar de poder possuir ligações polares. É o caso de tetraclorometano, CCl_4 , que, tendo quatro

ligações polares, é uma molécula apolar dado a soma dos vários momentos de dipolo, $\vec{\mu}_{\text{res}}$, ser nula. A figura seguinte ilustra o comportamento desta molécula perante um objecto electrizado.

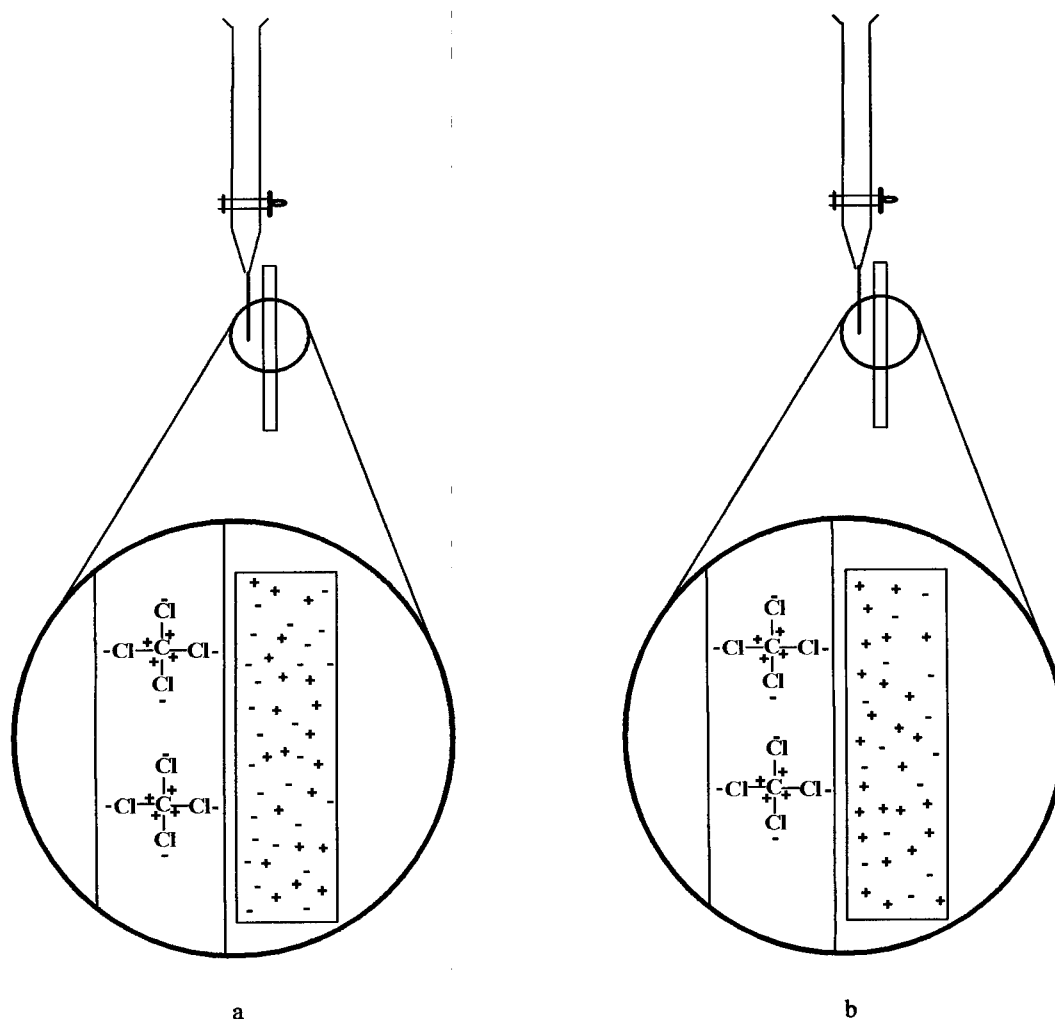


Figura 4.10- Interpretação do comportamento de CCl_4 relativamente a um objecto electrizado: a. com excesso de electrões; b. com deficiência de electrões. Em <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/interaccoes/index.html> pode ver-se a simulação do fenómeno.

Estratégias que ajudem os alunos a visualizar o “mundo microscópico” (átomos, moléculas, iões, *etc*) têm-se destacado como as que mais sucesso têm revelado na melhoria da visualização da Química a este nível (Sanger e Badger, 2001). As simulações em computador podem, pelas suas características (ver 2.2.1.), ajudar não só a visualizar e a compreender fenómenos químicos a este nível como, por extensão, a estimular e motivar os alunos, tornando atraente o estudo da Química.

Tendo em conta estes pressupostos, desenvolveu-se um conjunto de simulações associadas à visualização e interpretação da polaridade molecular. Estas simulações estavam complementadas por pequenos vídeos relativos a experiências reais. Procurou-se, assim, fazer a ligação entre o mundo microscópico e o mundo macroscópico. Houve, igualmente, a

preocupação de se utilizarem, na medida do possível, substâncias conhecidas dos alunos. A complementaridade dos vídeos atenua também as discrepâncias por vezes existentes entre o real e o simulacional.

4.1.2. Ponto da situação na Web

No sentido de se ter uma ideia do que existe acerca de simulações relativas à polaridade molecular, foi feita pesquisa na *Internet* contendo as palavras “molecular polarity simulation”, nos motores de busca mais actualizados, nomeadamente “Google”, “Copernic”, “Yahoo”, “Alltheweb” e “Chemweb” (portal com motor de busca).

Relacionado com o tema não foram encontradas simulações específicas, havendo apenas algumas animações (*e.g.*, a simulação do porquê de uma ligação ser polar em http://www.dit.ie/sci/chemistry/competition01/chemweb5/w_pol.html) bastante pobres, científica e pedagogicamente insuficientes para o pretendido.

O facto de haver um reduzido número de simulações *on-line* relativas à busca em causa e a necessidade de *algo mais* foi o ponto de partida para a concepção das mesmas. Em 4.2. apresentam-se com detalhe as simulações desenvolvidas e avaliadas junto dos alunos.

4.2. Simulação *on-line* desenvolvida

4.2.1. Descrição da simulação

Partindo da hipótese inicial (descrita em 2.1.), construiu-se uma simulação (melhor será dizer-se um conjunto de simulações), designada “Interacções”. Neste conjunto de simulações estão incluídos *links* (ligações) a alguns vídeos de experiências reais. A autoria e concepção destes módulos são do autor desta dissertação e dos respectivos orientadores, tendo a programação estado a cargo do Engenheiro Ilídio Martins.

Apesar de ser um *kit* simulações / vídeos e dado que as simulações constituem a parte central deste *kit*, é a estas que se dará ênfase. As simulações destinam-se ao ensino da polaridade molecular e pretende-se, primordialmente, mostrar o que ocorre, em termos microscópicos, quando se aproxima um objecto electrizado de determinadas substâncias moleculares contidas em buretas. Representa-se dinamicamente o comportamento dessas substâncias perante um objecto com carga eléctrica e o que se poderia observar (caso tal fosse possível). A electrização do objecto é igualmente simulada.

Deste modo, como já foi referido, o objectivo primordial é que os alunos sejam capazes de compreender e interpretar, através da visualização, o porquê de certas substâncias serem

atraídas por um corpo electrizado e outras não. Outros objectivos presentes, igualmente importantes, são:

- Reconhecer o processo de electrização por fricção.
- Explicar o que foi visualizado com base no conceito de dipolo, logo de molécula polar.
- Distinguir, com base num teste experimental simples, moléculas polares de moléculas apolares.

A simulação foi construída no programa *Macromedia Flash MX*, um programa particularmente vocacionado para animações e apresentações na *Internet* (Balieiro, 2002; Oliveira, 2002): editor de *script* (que permite, por exemplo, escolher e criar efeitos), imagens e elementos pré-definidos, facilidade de utilização, *layers* (“camadas” que, juntas numa linha de tempo, formam um filme) e execução automática de ficheiros em linguagem *HTML* (*HiperText Markup Language*, a extensão mais comum dos ficheiros na *Internet*).

Quando se entra na simulação, aparece uma imagem estática de um dos exemplos incluídos, constando, ainda, um conjunto de “ícones” de leitura intuitiva que permitem a qualquer utilizador sem conhecimentos profundos de computadores ou de informática interagir facilmente com eles (figura 4.11). Os ícones incluem duas “janelas” com opções e quatro botões.

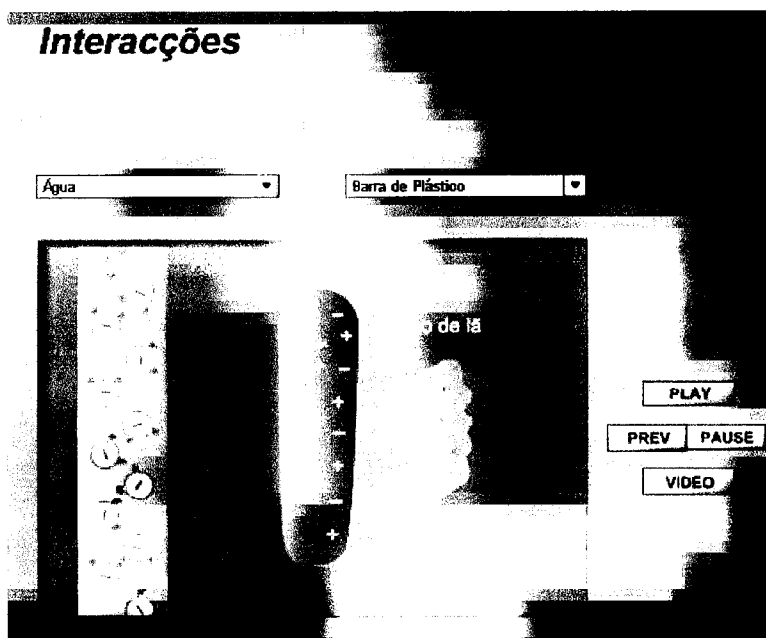


Figura 4.11- Imagem de entrada da simulação “Interacções”.

A janela situada do lado esquerdo contém nomes de substâncias moleculares, podendo ser aberta com o rato para seleccionar a substância pretendida (figura 4.12).

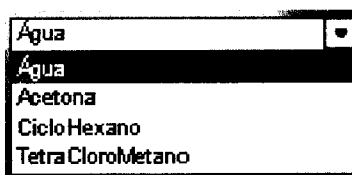


Figura 4.12- Janela mostrando substâncias a escolher para testar a polaridade das respectivas moléculas.

A janela situada à direita contém objectos de diversos materiais que poderão ser ou não electrizados, podendo igualmente ser seleccionados com o rato (figura 4.13).



Figura 4.13- Janela mostrando materiais a escolher para electrizar.

O comando “PLAY” permite (depois de escolhido um “par” substância / objecto) executar uma dada simulação, bastando carregar (clicar) nele. Caso não se escolha qualquer par, por defeito é escolhido o par Água / Barra de plástico.

O comando “PAUSE” permite parar a simulação cada vez que nele se carrega. Para voltar a correr a simulação, basta clicar novamente em “PLAY”. Estes comandos permitem correr a simulação a maior ou menor rapidez, sendo, por isso, importantíssimos a dois níveis:

- Permitem visualizar e reconhecer o movimento de cargas que existe (quando o há) quando os materiais são friccionados. Sem “PAUSE”, este movimento poderia, muito provavelmente, passar despercebido, principalmente a alunos irreverentes e sem a atenção requerida.
- Permitem, nos casos em que as moléculas são atraídas pelo objecto electrizado, igualmente visualizar o fenómeno, nomeadamente a orientação da molécula. Quando, por exemplo, um fio de água é atraído por uma régua de plástico (com excesso de carga negativa), é essencial que se veja na simulação a orientação das moléculas de água quando delas se aproxima o objecto, e isto pode ser facilitado se a simulação correr com menor rapidez. Mais do que *ver* o desvio, interessa *saber o porquê* do desvio, o que implica, necessariamente, uma visão adequada do fenómeno.

O botão “PREV” permite andar com a simulação “para trás”, podendo ver-se imagens anteriores.

O comando “VIDEO” permite a visualização de uma experiência real filmada, correspondente ao conjunto que tiver sido escolhido das duas janelas anteriores. Permite recordar e/ou ver uma experiência genuína, que não é uma imitação, animação ou simulação. Pretende-se, deste modo, fazer a ligação entre o mundo macroscópico (revelado pelos vídeos) e o mundo microscópico (simulações), capaz de propiciar uma compreensão genuína do que está em causa. Na figura 4.14 pode ver-se uma imagem estática de um dos vídeos.



Figura 4.14- Imagem do teste de polaridade com acetona.

É, assim, possível a comparação entre o que acontece à escala macroscópica e o que ocorre à escala microscópica. Na figura 4.15 compara-se para o caso da água.

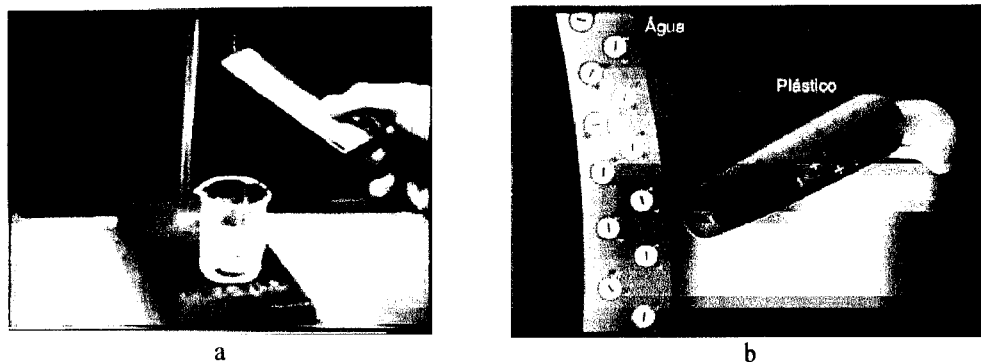


Figura 4.15- Comportamento de um fio de água perante um objecto de plástico eletrizado. a. Visualização ao nível macroscópico. b. Interpretação microscópica do mesmo fenómeno.

Escolhendo um par (por exemplo Água / Barra de plástico), clicando em “PLAY” inicia-se a simulação com a eletrização, por fricção, da barra de plástico. Com “PAUSE” é possível reconhecer, visualizando, o movimento de electrões que ocorre durante o processo. A aproximação da barra à água a correr em fio provoca uma orientação das moléculas H_2O , que “viram” o seu pólo positivo para a barra, que tem carga negativa. Novamente, a possibilidade deste pormenor ser apreendido e visualizado pode ser facilitado com a utilização sucessiva de “PAUSE” e “PLAY”.

A figura 4.16 mostra uma sequência de imagens estáticas da simulação, desde a electrização da barra até à sua aproximação a um fio de água, que é atraído.

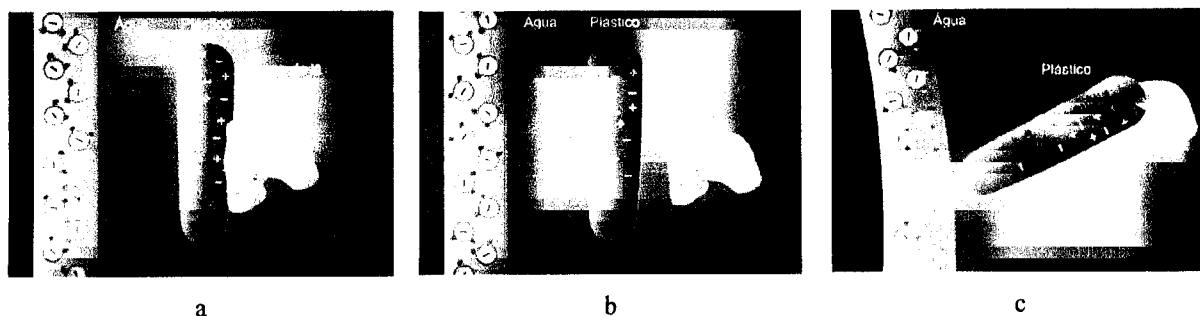


Figura 4.16- Imagens da electrização de uma barra de plástico e sua aproximação a um fio de água. No início (a) e no fim da electrização (b). Aproximação a um fio de água (c). Repare-se na orientação das moléculas de água antes da aproximação da barra (a e b) e aquando da sua aproximação (c).

4.2.2. Disponibilização na Web

Sendo a *Internet* o local de eleição para divulgação e difusão das simulações em computador, estas foram integradas no “Molecularium”, em www.molecularium.net (figura 4.17).



Figura 4.17- Imagem de entrada no “Molecularium” na Internet.

O “Molecularium” é um *site* português dedicado principalmente a simulações no âmbito da Química-Física, surgido na sequência do Projecto “Softciências” (Paiva, Gil e Fiolhais, 2000). Termodinâmica, equilíbrio líquido-vapor, solubilidade de sais são alguns exemplos dos temas explorados neste espaço. As simulações desenvolvidas foram integradas num ícone denominado “Ligações intermoleculares” (ver figura 4.17).

Clicando neste ícone, aparece no monitor uma série de ligações, entre as quais se inclui uma contendo “As moléculas de água são polares” (figura 4.18).

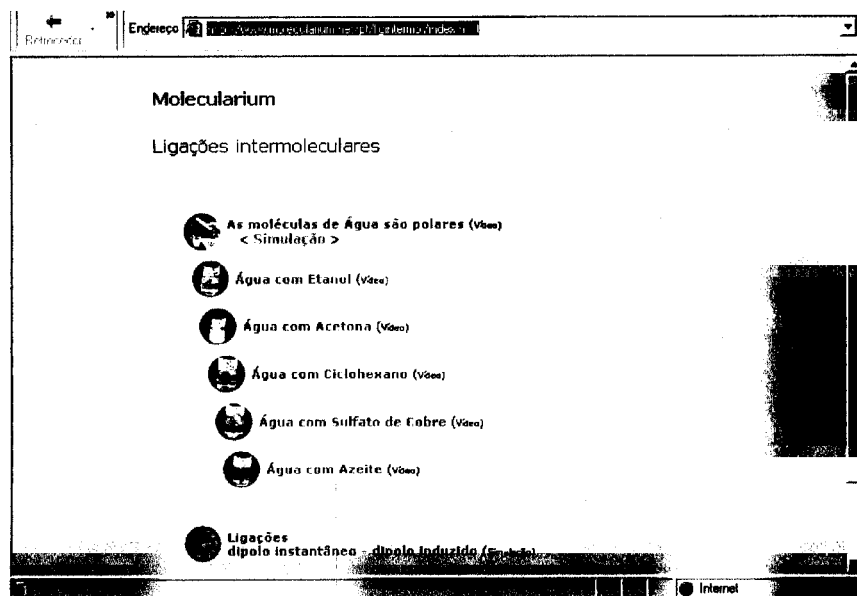


Figura 4.18- Imagem de entrada de “Ligações intermoleculares” na Internet.

Escolhendo a ligação “<Simulação>”, aparece o ecrã principal da simulação (figura 4.19).

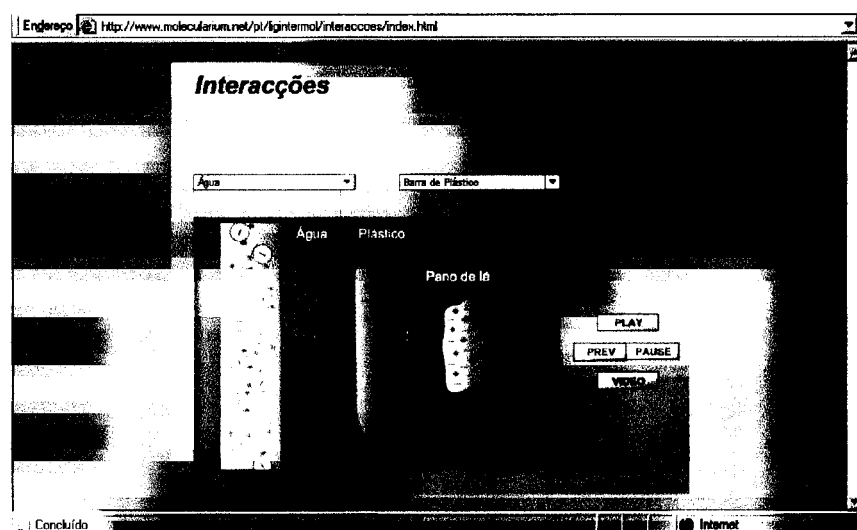


Figura 4.19- Imagem de entrada da simulação “Interacções” na Internet.

Através do endereço <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/index.html> é igualmente possível aceder (e directamente) às simulações.

Em qualquer dos casos, uma vez que as simulações foram construídas com tecnologia *Flash*, é necessário fazer o *download* do *Flash Player* para se poderem visualizar as simulações. Se o utilizador não tiver este programa instalado, poderá fazê-lo a partir de www.macromedia.com. Esta indicação aparece no monitor do computador, bastando segui-la.

4.2.3. Roteiro de exploração

Como forma de orientar os alunos na exploração das simulações, realçando alguns pormenores considerados (e já descritos) particularmente importantes, elaborou-se um roteiro com “passos” e instruções a serem seguidos, onde se incluíam tarefas a resolver como forma de auto-avaliação. Esta orientação é essencial, dado que uma exploração inadequada e feita “à sorte” poderá aumentar a confusão e não esclarecer os alunos. Qualquer material multimédia minimamente elaborado deverá ser explorado com um conjunto de procedimentos e orientações de forma a maximizar o seu aproveitamento. O roteiro utilizado pode ser consultado no anexo II.

4.3. Metodologia

4.3.1. Tipo de estudo

No sentido de testar a eficácia da utilização de simulações *on-line* no ensino / aprendizagem da polaridade molecular ao nível do 9º ano, escolheram-se dois grupos de alunos para o estudo: o grupo de controlo e o grupo experimental.

Por razões que se prendiam com a exequibilidade do estudo, que tinham a ver essencialmente com os horários dos alunos, com a disponibilidade da sala dos computadores utilizados e com constrangimentos de índole temporal (fazer-se o estudo sem sacrificar o cumprimento da planificação da disciplina), tornava-se impossível fazer uma escolha aleatória dos alunos. Deste modo, escolheram-se duas turmas o mais *equivalentes* possível, para um estudo *quase experimental*.

Sucintamente, o plano adoptado foi o seguinte (adaptado de Cohen e Manion, 1994):

Grupo experimental	O ₁	X	O ₂
Grupo de controlo	O ₃		O ₄



Neste plano, O₁ e O₂ correspondem a observações (neste caso, medidas de testes) ao grupo experimental em momentos diferentes, enquanto O₃ e O₄ correspondem às mesmas observações ao grupo de controlo e X corresponde ao tratamento (utilização do conjunto das simulações apoiadas por vídeos) cuja eficácia se quer ver confirmada ou rejeitada. O₁ e O₃ ocorreram num mesmo momento, tal como O₂ e O₄.

4.3.2. Caracterização da amostra

É de referir que a grande maioria dos alunos já havia sido discente do autor desta dissertação no 8º ano, o que *a priori* poderia facilitar a escolha, no sentido de seleccionar grupos o mais possível equivalentes. Além dos dados de natureza quantitativa (essencialmente níveis atribuídos ao longo do 1º e 2º períodos e resultados em testes de avaliação), foram igualmente utilizados dados de natureza qualitativa (essencialmente número de repetências e nível sociocultural). Estes últimos foram fornecidos pelos respectivos directores das turmas aquando da “Caracterização global da turma” a partir da recolha de informações das fichas biográficas dos alunos, no início do ano lectivo.

O grupo de controlo era constituído por 18 alunos de uma turma, sendo 10 do sexo feminino e 8 do sexo masculino, com idades entre os 14 e os 17 anos. O grupo experimental era constituído por 19 alunos, 13 do sexo feminino e 6 do sexo masculino, igualmente com idades entre os 14 e os 17 anos.

Em termos qualitativos, alguns dados apontam no sentido da equivalência dos grupos:

- Em ambos os grupos, a maioria dos alunos era proveniente de aldeias do concelho, filhos de pais predominantemente trabalhadores rurais e com habilitações literárias ao nível do 4º ano de escolaridade.
- No grupo de controlo, havia 6 alunos com 1 retenção, 3 alunos com 2 retenções e 2 alunos com 3 retenções. No grupo experimental, havia 9 alunos com 1 retenção, 2 alunos com 2 retenções e 1 aluno com 3 retenções.

Em termos quantitativos, e no que diz respeito à disciplina de Ciências Físico-Químicas, há a referir:

- No primeiro período, no grupo de controlo, 3 alunos obtiveram nível positivo (todos de elementos do sexo feminino) e 15 nível negativo. No grupo experimental, 4 alunos obtiveram nível positivo (3 elementos do sexo feminino e 1 do sexo masculino) e 15 nível negativo.

- No segundo período, no grupo de controlo, houve 5 níveis positivos (todos de elementos do sexo feminino) e 13 negativos, sendo estes números de 3 níveis positivos (todos de elementos do sexo feminino) e 16 negativos no grupo experimental.

Não tendo sido considerado imprescindível a realização de um pré-teste (dado que a matéria era completamente nova para os alunos, à excepção eventualmente de repetentes) para provar a equivalência dos grupos, tomaram-se os resultados dos testes até então realizados (anexo III). É até pertinente salientar que a realização de um pré-teste poderia sensibilizar os alunos relativamente aos objectivos do estudo, levando a que os resultados no pós-teste fossem, de alguma forma, influenciados pelo pré-teste (questões semelhantes, por exemplo) e não devidos apenas ao tratamento a que os grupos foram submetidos.

Um dos parâmetros que poderá dar uma ideia da equivalência dos grupos são as médias de cada grupo nos testes que haviam sido até então realizados. No gráfico seguinte pode verificar-se a evolução dos dois grupos ao longo do ano, antes de sujeitos ao ensino com simulações em computador.

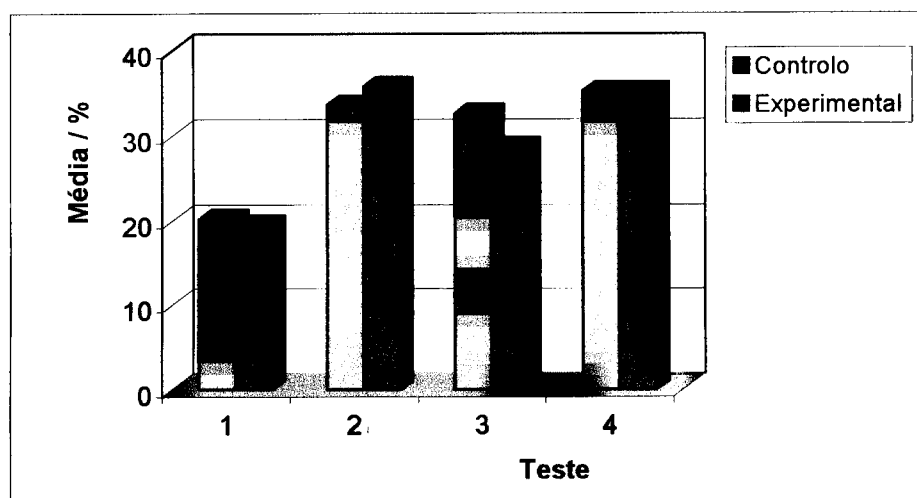


Gráfico 4.1- Comparação dos resultados (média dos testes) do grupo de controlo e do grupo experimental antes de ensino diferenciado.

Além dos valores das médias, procedeu-se, para cada um dos testes, a uma análise estatística através de um teste *t* de Student para amostras de variâncias diferentes, para um nível de significância estatística, α , de 0,05, valor mantido em todos os testes realizados. Parâmetros como o desvio padrão e o nível de significância estatística serviriam para provar (ou não) a equivalência. Estes parâmetros foram calculados na folha de cálculo *Microsoft Excel*, na aplicação *Analysis ToolPack*.

A tabela seguinte contém, além das médias ($\bar{x}$) dos testes, o desvio padrão (σ) e a significância estatística, p .

Parâmetro estatístico	Grupo		Teste
	Controlo	Experimental	
Média	20,2	19,5	1
Desvio padrão	17,2	11,1	
Significância estatística	0,4427		
Média	33,6	35,8	2
Desvio padrão	17,5	16,3	
Significância estatística	0,3418		
Média	32,6	28,7	3
Desvio padrão	21,4	12,3	
Significância estatística	0,2544		
Média	35,2	35,2	4
Desvio padrão	23,3	20,6	
Significância estatística	0,4976		

Tabela 4.2- Parâmetros estatísticos dos grupos de controlo e experimental antes de ensino diferencial.

Da análise dos resultados pode concluir-se que em todos os testes não há diferenças significativas, o que demonstra a equivalência dos dois grupos. Esta equivalência é imprescindível para se poder fazer, posteriormente, a comparação, após ensino diferenciado nos dois grupos.

Igualmente se poderá obter, para cada aluno, a média dos quatro testes (anexo III) e verificar a equivalência ou não dos dois grupos (tabela 4.3).

Parâmetro estatístico	Grupo	
	Controlo	Experimental
Média dos testes	30,8	30,1
Desvio padrão	17,4	12,0
Significância estatística	0,4423	

Tabela 4.3- Parâmetros estatísticos dos grupos de controlo e experimental relativamente à média dos testes antes de ensino diferencial.

Novamente se pode concluir não haver diferenças significativas, o que demonstra a equivalência dos dois grupos.

4.3.3. Limitações do estudo

Qualquer que seja o tipo de pesquisa e sua dimensão, as conclusões e generalizações que dela se podem extrair estão sempre condicionadas em termos de *validade*, quer *interna* quer *externa* (Cohen e Manion, 1994).

A validade interna está, neste caso, relacionada com a questão de se saber se o *tratamento* foi ou não responsável pela diferença, isto é, se os resultados obtidos são atribuíveis ao efeito da utilização do conjunto simulações / vídeos.

Neste sentido, a não selecção dos elementos dos dois grupos da amostra de forma aleatória poderá, eventualmente, ter influenciado os resultados, apesar de se terem escolhido dois grupos o mais possível equivalentes, o que poderá minimizar este efeito. Igualmente, haveria a considerar a possibilidade de os alunos de qualquer dos grupos (nomeadamente o grupo experimental) poderem utilizar (por exemplo, em casa) o computador para explorar as simulações. Este efeito foi minimizado recolhendo os roteiros dos alunos do grupo experimental no final de cada aula, sendo-lhes devolvido apenas após a realização do teste em que se avaliou o impacto do tratamento utilizado no grupo experimental.

Ainda se poderia objectar que a mudança de assuntos a abordar (passagem da Física para a Química) poderia interferir, eventualmente, na maior ou menor predisposição de um dos grupos para a Química. Parece, entretanto, pela experiência acumulada, que a haver (e há, em geral, uma maior predisposição para a Química) algum gosto acrescido, que o efeito seria equivalente nos dois grupos.

A validade externa está relacionada com a questão da generalização dos resultados, ou seja, se os resultados da experiência podem ou não ser generalizados a qualquer população.

A principal crítica à validade externa, neste caso, tem a ver com o número relativamente pequeno de sujeitos envolvidos no estudo, o que limita as generalizações e conclusões que dele se podem extrair. Mesmo tendo em conta que uma amostra com esta dimensão pode não ser representativa, “poderá fornecer bons *indícios* de conhecimento da realidade do universo” (Pardal e Correia, 1995, pp 33), não retirando, por isso, validade ao estudo.

Outra ameaça à validade externa tem a ver com o chamado “efeito do experimentador” e com o “efeito da novidade”. Relativamente à primeira, a generalização (extensão das principais conclusões, dos grupos em causa para a realidade nacional, por exemplo) dos resultados deste estudo está ameaçada, pois o impacto que uma simulação *on-line* pode ter, em termos de ensino e aprendizagem, pode depender de pessoa para pessoa, da sua

motivação, do seu entusiasmo, do modo como consegue ou não fazer uso adequado da simulação, *etc.* Por muito que se esforce na sua neutralidade, qualquer investigador empenhado, envolvido na investigação, poderá transmitir o seu empenho e motivação, “contagando” os alunos que, desta forma, poderão obter desempenhos diferentes dos obtidos com um investigador pouco empenhado e pouco envolvido no estudo. Desta forma, os resultados podem não ser generalizáveis, dado que outra pessoa poderia obter resultados diferentes. De forma semelhante, o facto do ensino com simulações poder ser novidade poderia trazer uma motivação acrescida aos alunos, podendo os resultados não ser atribuíveis apenas ao efeito do uso de simulações. O uso continuado de simulações *on-line* poderia levar a que os alunos baixassem os seus índices de entusiasmo com resultados eventualmente mais modestos. Por esta razão a generalização dos resultados está igualmente comprometida.

Finalmente, a existência dum pré-teste poderia ainda ser uma ameaça à validade do estudo, dado que poderia influenciar os resultados dos grupos no pós-teste ao sensibilizar os alunos previamente, fazendo com que eventuais ganhos no pós-teste pudessem ser o resultado não do tratamento mas, sim, de uma espécie de “treino” no pré-teste. Este aspecto pode aqui ser considerado desprezável, dado não ter havido a realização de qualquer pré-teste, pelas razões apontadas em 4.3.2.

4.3.4. Hipótese em estudo

A hipótese inicialmente formulada pretendia dar resposta à questão:

“Será que o ensino da polaridade e não polaridade molecular auxiliada por simulações em computador se revela eficaz no processo de ensino / aprendizagem destes conceitos, ao nível do 9º ano de escolaridade?”

Deste modo, pretendeu-se investigar se o grupo sujeito a uma aprendizagem com simulações, o grupo experimental, obteria, ou não, melhores resultados em questões relacionadas com a compreensão da polaridade molecular.

4.3.5. Procedimento

Em termos sintéticos, os conteúdos relacionados com a polaridade molecular foram leccionados de modo semelhante, nos dois grupos, durante duas aulas. As aulas incluíam, além dos conteúdos propriamente ditos, testes de polaridade com diversas substâncias (água, acetona, tetraclorometano, ciclohexano, hexeno e benzeno) que corriam em fio numa bureta (ver figura 4.7). Estes testes foram realizados pelos alunos. A interpretação do que ocorria em cada caso era feita em termos da polaridade / não polaridade das respectivas moléculas.

Desta forma, no grupo experimental o ensino foi complementado por um conjunto de aulas em computadores ligados à *Internet*, onde se fez a exploração dos vídeos e das simulações já descritas (ver 4.2.1.). Este último tratamento teve a duração de três aulas. Para o efeito, elaborou-se o roteiro de exploração, igualmente descrito (ver 4.2.3.).

Nestas aulas, os alunos trabalharam aos pares, tendo havido a preocupação de se colocar, em cada grupo, um aluno mais familiarizado com computadores com outro cuja experiência com computadores fosse menor. O professor, nestas aulas, desempenhou, essencialmente, um papel de guia e de orientador (apesar do roteiro incluído para exploração das simulações), ajudando os alunos na navegação e no esclarecimento de dúvidas.

O impacto do *kit* multimédia em termos de ensino / aprendizagem foi avaliado através das respostas a um conjunto de questões (enumeradas de 4 a 7) incluídas num teste de avaliação (anexo IV). Três das questões (4, 5 e 6) eram de escolha múltipla e uma (a 7) de composição. Como se pretendia dar o mesmo teste de avaliação, foi pedido a um colega que guardasse, numa sala, os alunos do grupo de controlo, que fariam teste posteriormente (logo a seguir ao grupo experimental). Há ainda a referir que, durante o ano lectivo, os testes foram sempre diferentes, embora equivalentes em conteúdo e grau de dificuldade.

Relativamente aos ganhos na aprendizagem, estes foram tratados estatisticamente de acordo com as sugestões de Glass e Hopkins (1984), minimizando o efeito da *regressão para a média*, fenómeno caracterizado pela tendência de alunos com notas baixas num pré-teste a subirem-nas no pós-teste e de alunos com notas altas no pré-teste tenderem a baixarem-nas no pós-teste (Glass e Hopkins, 1984; Cohen e Manion, 1994; Trochim, 2002). Medir ganhos de aprendizagem exclusivamente através da diferença entre as notas de um pré-teste e de um pós-teste não é correcto, dado que exclui esta tendência para a média.

Glass e Hopkins propõem um processo que consiste em utilizar a recta de regressão, obtida a partir da representação dos valores do pós-teste (eixo das ordenadas) em função do pré-teste (eixo das abcissas), para se calcular o valor previsto para o pós-teste. Os valores dos ganhos de aprendizagem são, então, calculados a partir da diferença entre os valores do pós-teste e o valor previsto (a partir da equação da recta de regressão), técnica usada, por exemplo, por Camilli e Bulkley (2001) e Pacheco (2001).

Genericamente, podem considerar-se as seguintes etapas para este tratamento dos dados:

- 1- Quantificação dos pré e pós-teste.

- 2- Representação dos valores do pós-teste (“eixo dos yy”) em função dos valores do pré-teste (“eixo dos xx”).
- 3- Obtenção da equação de regressão (do tipo $y = m x + b$, sendo m o declive da recta e b a ordenada na origem) a partir dos pares de valores anteriores.
- 4- Cálculo dos valores individuais previstos (y) no pós-teste a partir da equação anterior: $y = m x + b$, onde x é o valor do pré-teste de cada aluno.
- 5- Cálculo dos valores dos ganhos residuais (GR) individuais: diferença entre o valor do pós-teste e o valor previsto.
- 6- Cálculo dos valores dos ganhos residuais corrigidos (GRC) individuais: a cada GR foi somado o valor absoluto do menor ganho, de modo a não haver valores negativos.
- 7- Cálculo do valor do ganho residual corrigido médio (GRCM) para cada grupo.
- 8- Aplicação de um teste t de Student para verificar ou não a existência de diferenças estatisticamente significativas entre os GRCM dos dois grupos.

Estes cálculos foram efectuados no programa *Microsoft Excel*, na aplicação *Analysis ToolPack*.

4.4. Análise dos resultados

Os resultados obtidos pelos dois grupos encontram-se nos anexos V e VI. Na tabela 4.4 esses resultados estão expressos, em percentagem, em termos da média do grupo relativamente ao valor da cotação total da questão.

Avaliação por questão	Grupo controlo / %	Grupo experimental / %
4- Polaridade de H ₂ O (I)	3,6 / 8	4,6 / 8
5- Polaridade de CH ₃ COCH ₃	3,1 / 8	3,8 / 8
6- Não polaridade de C ₆ H ₁₄	5,8 / 8	7,2 / 8
7- Polaridade de H ₂ O (II)	1,8 / 15	4,4 / 15

Tabela 4.4- Resultados do grupo de controlo vs grupo experimental nas questões sobre polaridade molecular após ensino diferencial.

Em termos gráficos, é possível visualizar a diferença, por questão, nos dois grupos (gráfico 4.2).

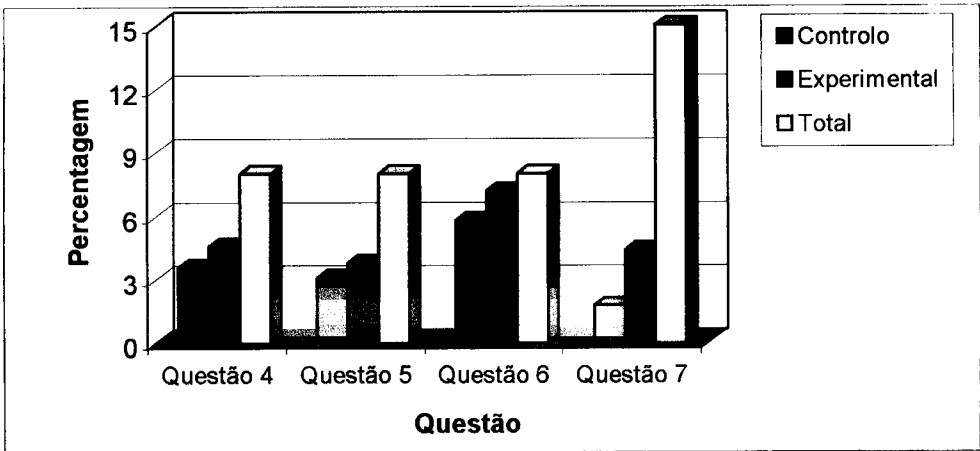


Gráfico 4.2- Comparação dos resultados (médias em percentagem), por questão, do grupo experimental e do grupo de controlo após ensino diferencial.

Além da média por questão, calcularam-se o desvio padrão e a significância estatística (tabela 4.5).

Parâmetro estatístico	Grupo		Questão
	Controlo	Experimental	
Média	3,6	4,6	4
Desvio padrão	4,09	4,06	
Significância estatística	0,2137		
Média	3,1	3,8	5
Desvio padrão	4,01	4,10	
Significância estatística	0,3072		
Média	5,8	7,2	6
Desvio padrão	3,69	2,52	
Significância estatística	0,0981		
Média	1,8	4,4	7
Desvio padrão	3,28	4,62	
Significância estatística	0,0286		

Tabela 4.5- Parâmetros estatísticos dos grupos de controlo e experimental após ensino diferencial.

Da tabela anterior pode concluir-se que as diferenças de médias entre o grupo experimental e o grupo de controlo, relativamente às questões 4 e 5, não são estatisticamente significativas, embora seja de notar um desempenho ligeiramente melhor do grupo experimental. Quanto à questão 6 e sobretudo na questão 7, as diferenças de médias são significativas, sendo claramente favoráveis ao grupo experimental.

Um aspecto a ser estudado é o da chamada regressão estatística para a média. Este fenómeno pode ocorrer se o intervalo de tempo entre o pré-teste e o pós-teste for grande e por falta de fiabilidade dos instrumentos de avaliação (Cohen e Manion, 1994). Na prática, traduz-se pelo facto de sujeitos que obtiveram no pré-teste resultados elevados baixarem no pós-teste e sujeitos que obtiveram resultados baixos no pré-teste os subirem no pós-teste.

No estudo do efeito da regressão estatística para a média, seguiu-se o procedimento descrito em 4.3.5.

Começou-se considerando como pré-teste para cada aluno a média dos testes anteriores e como média para o pós-teste uma extrapolação (para 100 %) a partir das quatro questões incluídas no teste realizado (anexo VI).

Com os dados anteriores representaram-se os valores do pós-teste (eixo das ordenadas) em função dos valores do pré-teste (eixo das abcissas), a partir dos quais se obteve a equação de regressão (gráfico 4.3).

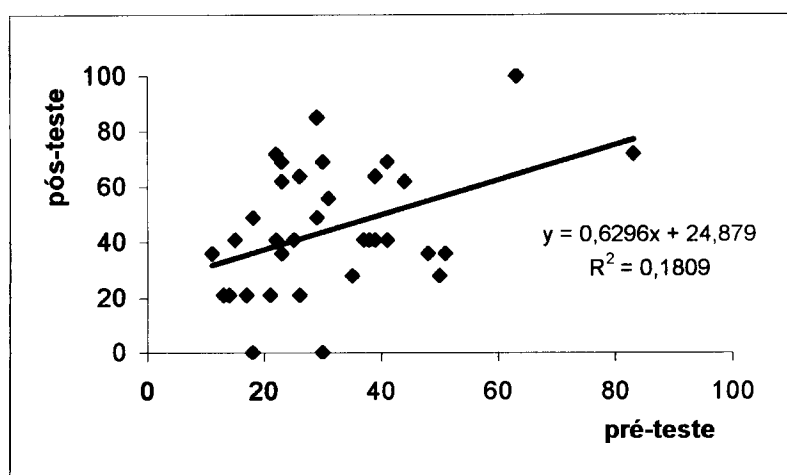


Gráfico 4.3- Representação dos resultados do pós-teste em função do pré-teste. Indica-se igualmente a equação da recta.

Da equação anterior calcularam-se, por substituição de x pelo valor do pré-teste, os valores previstos no pós-teste para os dois grupos. Com estes últimos valores obtiveram-se os valores dos ganhos residuais (GR) para cada aluno: diferença entre o valor do pós-teste e o valor previsto no mesmo.

A cada GR foi adicionado o valor absoluto do menor ganho, obtendo-se os ganhos residuais corrigidos (GRC) para cada aluno. No gráfico seguinte representam-se os GRC individuais.

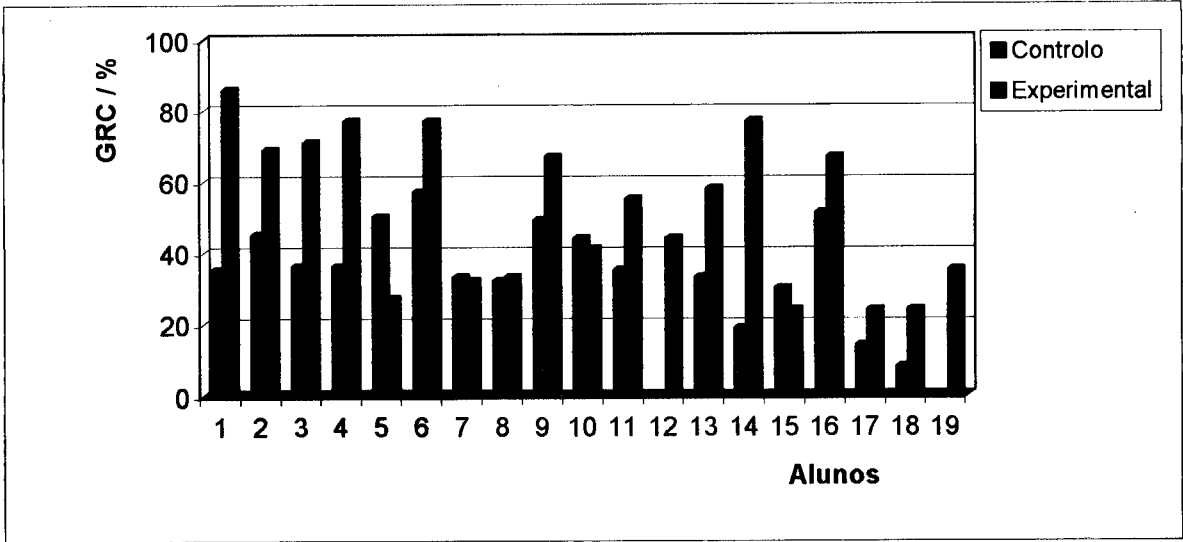


Gráfico 4.4- Comparação dos ganhos residuais corrigidos (GRC) individuais no grupo de controlo e no grupo experimental.

Dos valores dos GRC calculou-se, para cada grupo, o valor do ganho residual corrigido médio (GRCM), tendo-se obtido o valor 38 para o grupo controlo e 52 para o grupo experimental. No anexo VI apresentam-se todos os valores calculados.

Procedeu-se a uma análise *t* de Student, tal como nos casos anteriores, apresentando-se na tabela seguinte estes valores.

Parâmetro estatístico	Grupo	
	Controlo	Experimental
Média	38	52
Desvio padrão	15,8	21,3
Significância estatística	0,01331	

Tabela 4.6- Comparação dos parâmetros estatísticos relativos aos GRCM no grupo de controlo e no grupo experimental.

Os dados apontam claramente para a existência de diferenças estatisticamente muito significativas entre os grupos, com vantagem para o grupo experimental.

De um modo geral e na sequência do exposto anteriormente, dos resultados sobressai que estes foram melhores no grupo experimental, em todas as questões relacionadas com a polaridade / não polaridade molecular. Uma análise mais detalhada permite, entretanto, destacar alguns aspectos:

- Nas questões 4 e 5 não houve grande discrepância nos resultados embora se tenha verificado um desempenho ligeiramente melhor do grupo experimental. Na questão 6

a discrepância, embora maior, não foi muito significativa. Estes resultados poderão atribuir-se ao facto de o ensino e as actividades experimentais relacionadas com os conteúdos leccionados terem sido semelhantes nos dois grupos, onde os alunos desempenharam um papel activo na realização das mesmas, nomeadamente nos testes de polaridade. Teoricamente, seria de esperar que os resultados nestas questões não fossem muito diferentes. Resultados semelhantes foram obtidos por Bourque e Carlson (1987). Pode aqui estar implícita a importância do trabalho experimental e do *hands-on*, do *aprender fazendo*, do contacto directo com os materiais no processo de aprendizagem em Química (Bourque e Carlson, 1987).

- As melhores *performances* do grupo experimental, relativamente às mesmas questões, poderão estar relacionadas com o facto de, durante o roteiro de exploração, serem colocadas questões de auto-avaliação. Estes melhores desempenhos mostram que a utilização das simulações, após ensino tradicional, poderá desempenhar um papel importante no sentido de reforçar e consolidar conhecimentos.
- A grande discrepância no que diz respeito à interpretação do comportamento de H_2O perante um objecto electrizado (questão 7) pode atribuir-se ao efeito do uso da simulação. O facto de apenas um sujeito do grupo de controlo descrever, e de forma incompleta, o comportamento de H_2O em termos da orientação do pólo adequado tendo em conta a carga eléctrica do objecto que dela se aproxima indica que a compreensão da polaridade da água é favorecida pela simulação. Tal é, ainda, corroborado pelo facto de apenas os alunos que utilizaram a simulação descreverem o fenómeno com base na “rotação” do pólo da água de carga contrária ao do objecto electrizado. Novamente se evidencia a importância das simulações na compreensão e visualização de fenómenos químicos a nível microscópico.

Em resumo, os resultados parecem indiciar a importância da visualização e interpretação, ao nível atómico / molecular, do que ocorre para se compreender a polaridade molecular, sugerindo que a simulação computacional é capaz de favorecer a compreensão conceptual do fenómeno.

No entanto, nem tudo ficou claro, mesmo no grupo experimental. Voltando a um dos problemas centrais que se prende com a compreensão do que ocorre a nível microscópico, há a referir que muitos alunos (ou melhor, a maioria) responderam correctamente na questão 4, relacionada com o comportamento da água perante um objecto com excesso de carga eléctrica negativa (uma régua de plástico electrizada), e não conseguiram responder, justificando, como

a mesma molécula se comportaria perante uma vara de vidro electrizada de carga contrária (com deficiência de electrões), na questão 7. Isto mostra que a compreensão da polaridade da água não está plenamente conseguida. Apesar de muitos alunos responderem que a água é polar, não foram capazes de aplicar o conceito a uma “nova” situação. De facto, 11 alunos do grupo experimental (58 % do total deste grupo) responderam à primeira questão e apenas 4 (21 % do total) responderam, com algum fundamento, a uma questão praticamente igual, o que dá que pensar. Destes 4, apenas 1 respondeu integralmente à questão. Esta discrepância pode ser verificada no gráfico seguinte.

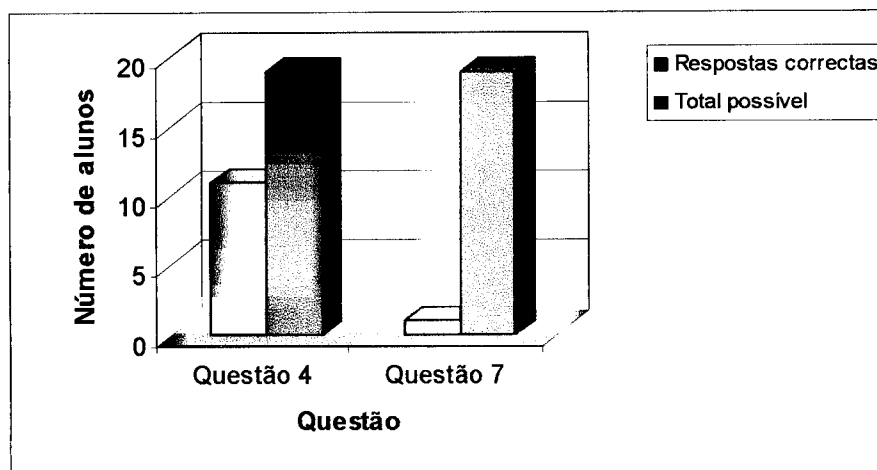


Gráfico 4.5- Comparação entre o número de alunos a responder correctamente às questões relativas à polaridade de H₂O: escolha múltipla (4); de composição com justificação (7).

Isto prova que o “âmago” da questão, ou seja, a compreensão integrada da água como um dipolo eléctrico, não foi apreendido plenamente, sendo, certamente, necessário insistir em aprofundar a pesquisa no sentido de ultrapassar esta não transferência. Alargar o leque de representações simbólicas e, até, de melhorias ao nível da simulação (*links* com explicação, questões de escolha múltipla com *feedback* ao utilizador) são algumas hipóteses em aberto, a não desprezar.

Embora não se tenham obtido dados de natureza qualitativa (por exemplo, preenchimento de um inquérito) acerca do ensino realizado, é possível, no entanto, referir que a generalidade dos alunos apreciou as aulas dedicadas à exploração do *kit* multimédia. Foi evidente o seu entusiasmo e a sua preocupação em responder às questões colocadas durante o roteiro e, até, de compreender os conteúdos que fundamentam a polaridade molecular. É de destacar, ainda, a responsabilidade e o comportamento correcto acrescido revelado pelos alunos durante estas aulas.

Capítulo 5

Caso II: Ensino da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido no 12º ano

5- Caso II: Ensino da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido no 12º ano

5.1. Contexto

5.1.1. Contexto científico-pedagógico

O ensino da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, no 12º ano de escolaridade, está integrado na unidade “Ligações intermoleculares e equações dos gases” (Programa de Química do 12º ano, 1995).

Na base de qualquer ligação entre moléculas está o conceito de um dipolo eléctrico (Gil, 2001), que poderá já existir (*e.g.*, em HCl, um dipolo permanente) ou que tenha que ser formado, como é o caso de moléculas apolares (O_2 , N_2 , CH_4 , *etc.*). No caso de moléculas apolares, para que ocorra ligação entre elas tem que haver a sua polarização prévia: formarem-se dipolos instantâneos por acumulação de electrões numa dada zona da molécula, dipolos esses que induzem dipolos noutras moléculas adjacentes, os dipolos induzidos. O processo foi anteriormente descrito em 3.3.1. Um dos aspectos que os alunos costumam referir como difícil de compreender é a formação dos dipolos instantâneos e dos dipolos induzidos. Outro aspecto de compreensão difícil é explicar por que se formam dipolos nestas moléculas de modo a permitir a sua ligação. Os manuais contêm, em geral, representações estáticas do fenómeno bastante simplistas, com imagens e esquemas explicativos que são insuficientes. Há manuais (*e. g.*, Pereira e Camões, 1998), que, pura e simplesmente, são omissos na abordagem do assunto, apesar de ser matéria obrigatória de estudo.

Tal como no caso da problemática da polaridade / não polaridade molecular, está-se no mundo do infinitamente pequeno, com os constrangimentos anteriormente apontados (ver 4.1.1.). Embora o assunto “Ligações intermoleculares” não esteja muito investigado e, como tal, não há muita literatura sobre o mesmo, encontram-se, no entanto, algumas dificuldades e/ou ideias erradas já descritas:

- A polarização das moléculas (no caso da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido) conduz à sua ionização, isto é, quando se formam dipolos por acumulação momentânea de electrões numa dada zona das moléculas, estas passam a estar carregadas electricamente, transformando-se, então, em iões.
(<http://www.glenbrook.k12.il.us/gbssci/phys/Class/estatics/u8l1e.html>).
- A intensidade das ligações covalentes (intramoleculares) e das ligações intermoleculares é semelhante (Horton, 2001).

- Ligações intermoleculares são as forças dentro de uma molécula, ou seja, intramoleculares (Peterson e Treagust, 1989).
- Rompem-se ligações intramoleculares numa mudança de estado (Peterson *et al*, 1989).
- As ligações intermoleculares são atracções e não ligações (Barker e Millar, 2000).

Destes estudos há a destacar, essencialmente, a não distinção entre forças intermoleculares e intramoleculares, quer em termos de intensidade relativa quer em termos de conceito. Outro aspecto que merece ser destacado é a ideia errada de que a polarização instantânea das moléculas provoca a sua ionização.

Relativamente à ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, detectaram-se outras dificuldades através das entrevistas aos alunos (anexos VII, VIII e IX) levadas a cabo no âmbito do presente estudo:

- Uma compreensão deficiente sobre o processo de formação dos dipolos induzidos a partir dos dipolos instantâneos.
- Não reconhecimento da necessidade de formação de dipolos para que ocorra ligação entre estas moléculas.
- Confusão entre ligações intramoleculares e intermoleculares, sendo ambas feitas à custa de electrões partilhados.
- A formação de dipolos induzidos por transferência de electrões de moléculas vizinhas.
- Associação entre dipolo instantâneo e ligação instantânea: a ligação entre moléculas é momentânea por causa de o dipolo ser instantâneo.
- A repulsão de electrões, induzida pelo dipolo instantâneo, vai provocar, no dipolo induzido, a sua “perda”, ficando (o induzido), então, com menos electrões.

5.1.2. Ponto da situação na Web

No sentido de se ter uma ideia do que existia acerca de simulações relativas a forças intermoleculares, foi efectuada pesquisa na *net* contendo as palavras “intermolecular forces simulation”, nos motores de busca mais actualizados, nomeadamente “Google”, “Copernic”, “Yahoo” e Alltheweb. Utilizou-se igualmente o “Chemweb”. Relacionado com o tema foram encontrados cerca de dez endereços, os quais foram incluídos no portal de cultura científica “Mocho” (www.mocho.pt). No anexo X apresentam-se endereços (com descrição sumária) de simulações interessantes para ensino e aprendizagem de ligações intermoleculares.

Sobre a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, não se encontrou qualquer simulação satisfatória, destacando-se apenas duas simulações muito simplistas e rudimentares em <http://www.umr.edu/~gbert/INTERACT/intermolecular.HTM#iondipole> e em <http://www2.gasou.edu/chemdept/general/molecule/forces.htm>. Por estas razões construiu-se uma simulação específica para tal.

5.2. Simulação *on-line* desenvolvida

5.2.1. Descrição da simulação

Esta simulação, designada “Dipolo”, representa dinamicamente a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, desde a polarização inicial de uma molécula até à ligação intermolecular propriamente dita. Pretende-se, primordialmente, através do seu dinamismo, ajudar à visualização e compreensão deste tipo de ligação intermolecular, nomeadamente de alguns aspectos problemáticos, em termos de ensino e aprendizagem, identificados através de entrevistas:

- Relacionar a formação de dipolos induzidos com a formação de dipolos instantâneos.
- Reconhecer o movimento de cargas eléctricas na formação de dipolos induzidos.
- Visualizar a ligação em termos de atracção entre dipolos.
- Reconhecer o dinamismo inerente ao processo.

Em termos de ensino e aprendizagem da Química, a simulação destina-se principalmente a alunos do 12º ano, embora possa ser utilizada igualmente com alunos que iniciam cursos superiores de Química.

A simulação foi igualmente construída no programa *Macromedia Flash MX*, pelas características já descritas (ver 4.2.1.).

Esta simulação foi construída e alterada tendo em conta o *feedback* e algumas sugestões dos entrevistados (anexo IX) consideradas pertinentes e capazes de a melhorar. Descrevem-se seguidamente as várias versões que foram sendo construídas e modificadas.

Numa primeira versão, a simulação abria imediatamente com a animação sequencial, por etapas, do processo que conduz à ligação intermolecular. Nesta versão, além dos diversos passos do processo, incluía-se um comando “REPLAY” que permite ao utilizador rever, sempre que quisesse, a simulação. Na figura 5.1 apresenta-se a imagem final da simulação.

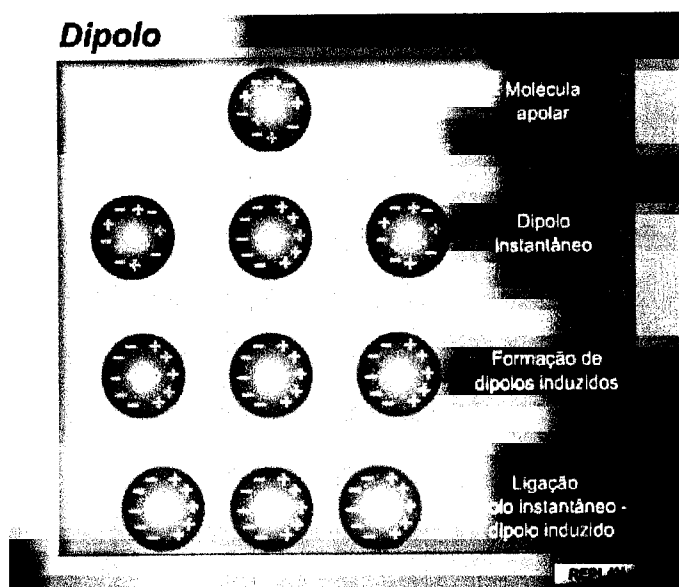


Figura 5.1- Imagem estática final da simulação “Dipolo”, na sua primeira versão.

Numa segunda versão, na simulação foram incluídos pequenos ficheiros áudio explicativos de cada uma das imagens. A inclusão de uma explicação áudio simultânea que acompanhe as imagens poderá contribuir para uma melhor compreensão do fenómeno. Estes ficheiros foram incluídos na simulação na forma de um ícone “som”. Na figura 5.2 apresenta-se a imagem final da simulação.

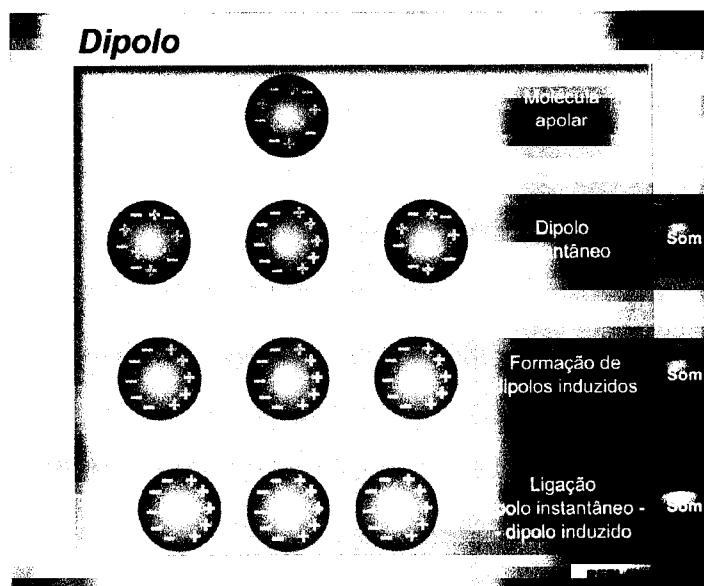


Figura 5.2- Imagem estática final da simulação “Dipolo”, na sua segunda versão.

Numa terceira versão, de forma a tornar a simulação mais realista e, sobretudo, interactiva, foram introduzidas as seguintes modificações:

- Inclusão de mais duas imagens de “moléculas apolares”, de modo a dar ideia da existência inicial das moléculas.
- Inclusão de texto, além da voz, podendo o utilizador ler os conteúdos que explicam cada fase da simulação.
- Inclusão de um comando “AVANÇAR” / “PAUSAR” para permitir à simulação avançar ou parar, respectivamente. Isto é particularmente relevante para a visualização do movimento de cargas eléctricas que ocorre aquando da formação do(s) dipolo(s) induzido(s) pelo(s) dipolo(s) instantâneo(s). Na figura seguinte pode ver-se uma imagem estática correspondente a uma fase intermédia da formação dos dipolos induzidos. A visualização dos movimentos das cargas eléctricas é, assim, facilitada por este comando.

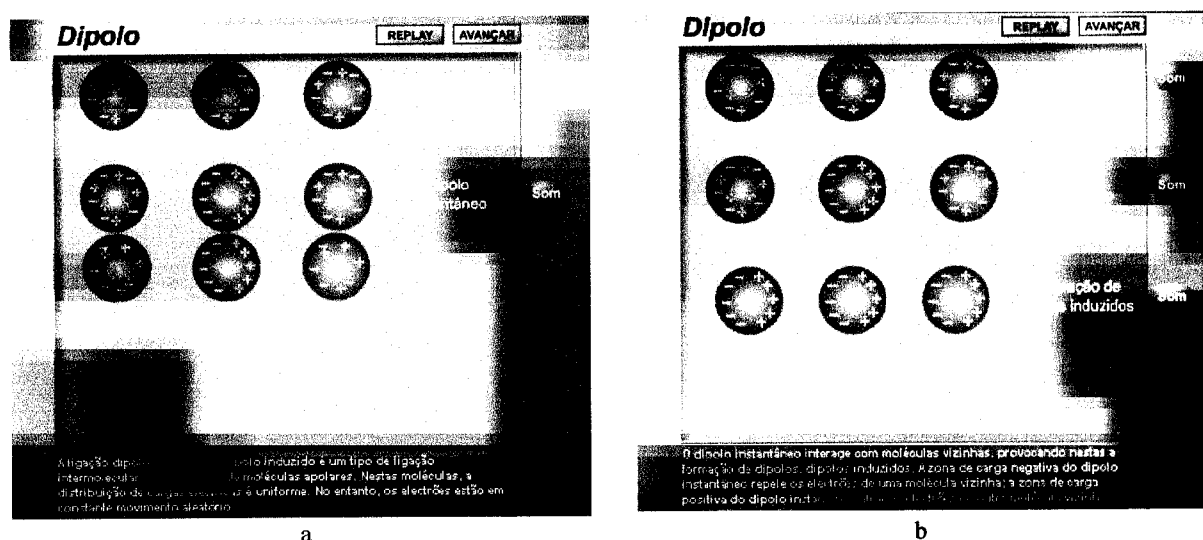


Figura 5.3- Imagem da simulação “Dipolo” evidenciando a utilização do comando “AVANÇAR” para a visualização do movimento de cargas eléctricas durante a formação dos dipolos induzidos: a é uma fase intermédia; b é a fase final.

Na figura 5.4 apresenta-se imagem final da simulação.

5.2.2. Disponibilização na Web

Tal como com a simulação “Interacções”, esta simulação foi igualmente incluída no “Molecularium” (www.molecularium.net), escolhendo-se, então o ícone “ligações intermoleculares”. Clicando, então, em “Ligações dipolo instantâneo - dipolo induzido (simulação)”, aparece e corre imediatamente a simulação. Através do endereço <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/dipolo/index.html> é possível aceder directamente à simulação (figura 5.5).



Figura 5.4- Imagem estática final da simulação "Dipolo", na sua terceira versão.

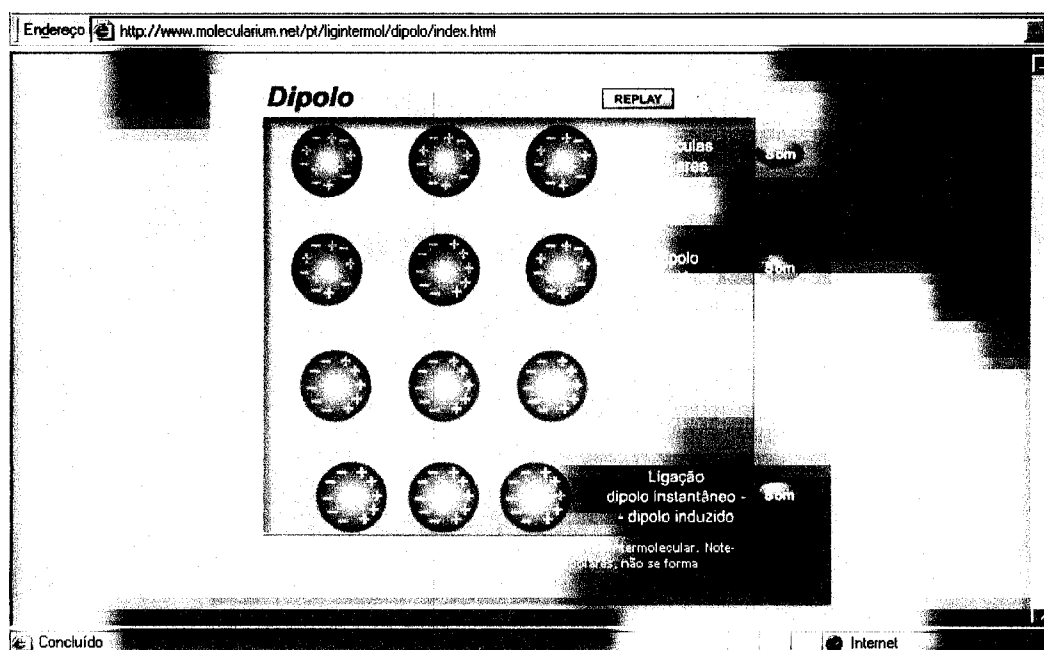


Figura 5.5- Imagem final da simulação "Dipolo" (terceira versão) na Internet.

5.3. Metodologia

5.3.1. Tipo de estudo

No sentido de testar a hipótese inicial, ou seja, em que medida uma simulação facilitaria a visualização e compreensão da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, escolheram-se alunos voluntários da única turma do 12º ano, tendo-se adoptado o seguinte plano (Cohen e Manion, 1994):

O₁ X O₂

Neste plano, O₁ refere-se à observação do grupo no que diz respeito a aspectos problemáticos da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido antes da utilização da simulação, X, e O₂ a observação após utilização da simulação. Grosso modo, serão um “pré-teste” e um “pós-teste”, respectivamente. X refere-se ao *tratamento* a que o grupo foi sujeito, a simulação “Dipolo”.

5.3.2. Caracterização da amostra

Escolheu-se um conjunto de 8 alunos voluntários da única turma do 12º ano, 6 do sexo feminino e 2 do sexo masculino, a quem foram colocadas uma série de questões na forma de duas entrevistas, uma antes e outra após a visualização da simulação. O facto de as entrevistas serem voluntárias (como deve ser) tornam a amostra mais pequena que o desejável. Este número estava já, à partida, limitado dado que a turma era constituída apenas por 11 alunos. Destes 8 alunos, 6 concederam entrevista antes (“parte 1”) e após tratamento (“parte 2”), tendo os 2 restantes concedido apenas a “parte 1”. Tal aconteceu porque não foi possível realizar a “parte 2” por imperativos de tempo, dado ser necessário cumprir o programa da disciplina, já de si extenso, e preparar, o melhor possível, os alunos para um exame nacional que, sendo uma prova específica, tem um peso considerável na nota de candidatura ao ensino superior.

5.3.3. Limitações do estudo

A validade interna está, neste caso, relacionada com a questão de se saber se o tratamento foi ou não responsável pelas diferenças observadas antes (pré-teste) e após (pós-teste) a visualização da simulação.

Existe, novamente, limitação devido a uma escolha não aleatória dos sujeitos da amostra. Neste caso, devido ao reduzido número de alunos da turma (11), pode afirmar-se que praticamente não seria possível de outra forma.

A validade externa está, aqui, claramente ameaçada pela representatividade da amostra.

Novamente, apesar de uma amostra com esta dimensão poder não ser representativa, poderá fornecer bons indícios de conhecimento da realidade do universo. A representatividade estava, à partida, condicionada pelo reduzido número de alunos da turma (ver 5.3.2.).

Outro problema que se poderia colocar era o de o pré-teste e pós-teste serem muito semelhantes (nomeadamente as primeiras questões), o que poderia influenciar as respostas

dos alunos na segunda entrevista. Este efeito foi minimizado fazendo as entrevistas separadas temporalmente, de modo a que se “diluíssem” as questões colocadas na primeira entrevista.

5.3.4. Procedimento

Os conteúdos (ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido) foram leccionados conforme a planificação das aulas para o 12º ano. No sentido de avaliar o impacto da simulação computacional e de obter, inclusive, algum *feedback* capaz de contribuir para a melhoria de futuras versões, utilizou-se uma entrevista *semi-estruturada* (Pardal e Correia, 1995).

A entrevista como metodologia de investigação apresenta algumas vantagens relativamente a outras formas de investigação, nomeadamente (Ludke e André, 1986; Pardal e Correia, 1995):

- Possibilita uma relação interactiva entre entrevistador e entrevistado, criando uma atmosfera de influência recíproca entre quem pergunta e quem responde.
- Apresenta uma vasta aplicabilidade, podendo ser aplicada a qualquer pessoa (mesmo analfabeta) e a qualquer assunto.
- Permite a captação imediata da informação pretendida, podendo ainda aprofundar questões ou dúvidas que surjam no decurso da mesma.

Por outro lado, apresenta algumas limitações, como o facto de ser restrita a pequenos universos e o facto de ser dispendiosa em termos de tempo.

Há, ainda, um conjunto de requisitos que devem ser tidos em conta, nomeadamente:

- Respeito pelo local e horário do entrevistado.
- Uso de vocabulário próprio de modo a não confirmar as expectativas de quem entrevista.
- Capacidade de o entrevistador ouvir sem forçar o rumo das respostas, estimulando a informação.
- Fuga às respostas do tipo “Sim” / “Não”.

A escolha da entrevista como metodologia de investigação para o 12º ano deveu-se, essencialmente, ao facto de não ser possível, por outra forma (inquérito, questionário, *etc*) detectar dificuldades em termos da compreensão da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. De facto, só a entrevista poderia servir para a percepção de algumas dificuldades

através das perguntas que eram colocadas e que poderiam ser aprofundadas no sentido de se descobrirem as causas dessas mesmas dificuldades.

A entrevista continha uma série de perguntas “chave” suficientemente abertas e cuja ordem poderia, eventualmente, ser alterada de acordo com a sequência da entrevista, nomeadamente tendo em conta as respostas dos entrevistados.

Os alunos foram entrevistados, pela primeira vez, após o assunto ter sido leccionado. Com esta entrevista (anexo VII) pretendia-se, essencialmente, procurar aspectos ligados à ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido que suscitassem dúvidas ou que apresentassem dificuldades aos alunos.

Após visualização da simulação, os alunos foram novamente entrevistados. Com esta entrevista (anexo VIII), pretendia-se verificar em que medida a visualização da simulação era capaz ou não de esclarecer as dúvidas e as dificuldades detectadas anteriormente. Eram, igualmente, pedidas sugestões aos entrevistados para aperfeiçoamento da simulação. (As entrevistas completas constam do anexo IX.)

Em todos os casos, a simulação que foi utilizada foi a primeira versão (ver 5.2.1.).

5.4. Análise dos resultados

Tendo em conta a metodologia de investigação utilizada (entrevista), a análise dos resultados será apenas de natureza qualitativa.

Assim, durante a primeira entrevista (“parte 1”), os aspectos que mais suscitaram dúvidas ou que se revelaram difíceis, segundo os entrevistados (En), foram:

- Uma compreensão deficiente sobre o processo de formação dos dipolos induzidos a partir dos dipolos instantâneos (E1, E2, E3, E4, E7 e E8).
- Não reconhecimento da necessidade de formação de dipolos para que ocorra ligação entre moléculas (todos, à excepção de E1).
- Confusão entre ligações intramoleculares e intermoleculares, sendo ambas feitas à custa de electrões partilhados (E1 e E6).
- A formação de dipolos induzidos por transferência de electrões de moléculas vizinhas (E7).
- Confusão entre dipolos instantâneos (moléculas apolares) e dipolos permanentes (referência à água), sendo estes semelhantes (E8).

- A associação entre ligação instantânea e dipolo instantâneo: a ligação entre moléculas é momentânea por causa do dipolo ser instantâneo (E8).
- A repulsão de electrões, induzida pelo dipolo instantâneo, vai provocar, no dipolo induzido, a sua “perda”, ficando, então, com menos electrões (E8).
- O não reconhecimento da interacção (repulsão) entre electrões aquando da formação dos dipolos induzidos (E1, E2 e E3).

A simulação “Dipolo” foi, de um modo geral, elogiada pelos alunos como útil para uma melhor visualização e compreensão do fenómeno. Há, entretanto, alguns aspectos que foram destacados em particular:

- Uma sensação mais realista da formação do dipolo instantâneo parece ser favorecida pela simulação. Opinião de um dos entrevistados:

“Por exemplo, quando demonstra a formação do dipolo instantâneo, há movimento dos sinais que designam a parte mais positiva e a parte mais negativa para os lados duma molécula, para os lados extremos da molécula e isso dá melhor a sensação da formação do dipolo” (E3).

- O movimento de cargas, aquando da formação dos dipolos induzidos e que é evidenciado pela simulação, mostra que esta poderá facilitar a compreensão deste aspecto essencial, como se pode concluir por algumas opiniões:

“Sobre a simulação? Acho que uma pessoa consegue compreender bem a formação dos dipolos” (E1).

“Permite visualizar como é que o dipolo instantâneo induz noutra molécula o dipolo, o dipolo induzido, e assim visualiza-se melhor e acho que se percebe um pouco melhor como é que se forma os dipolos” (E4).

“Interessante nesta questão é a gente olhar e ver realmente as cargas a movimentarem-se nos dipolos induzidos por indução do dipolo instantâneo. Isso é bastante interessante” (E6).

- A dinâmica do processo, global e sequencialmente, é outro aspecto que mereceu, por parte dos entrevistados, apreciação positiva: A simulação apresenta o conjunto de etapas que ocorrem durante o fenómeno, ajudando à visualização deste como um todo. Algumas opiniões corroboram esta afirmação:

“Primeiro, num primeiro momento, apresentou uma molécula apolar e depois a assimetria de cargas, o que levou à indução de novas moléculas, o que permitiu a ligação intermolecular; isso permite visualizar melhor e compreender melhor o processo” (E2).

“Dá-nos a conhecer, demonstra a formação do primeiro dipolo, depois o que provoca (...) nas outras moléculas esse dipolo e depois dá-nos a formação mesmo da ligação, dá-nos uma visualização disso” (E3).

“Dá-nos uma melhor visualização daquilo que se passa porque é tudo em termos muito abstractos; assim, dá-nos uma coisa mais concreta para nós nos apoiarmos, para percebermos mais conforme elas se efectuam” (E3).

“Pela positiva, tem as fases todas da formação da ligação, é bastante explícita” (E5).

- O efeito de ser uma animação é um factor que ajuda a “prender” quem a vê, o que pode ser um factor de motivação:

“De positivo? Acho que ... Pronto, tem a animação que chama a atenção, uma animação chama sempre a atenção” (E6).

Um aspecto importante é a opinião dos entrevistados acerca da simulação no que se refere a alterações no sentido de a melhorar. Enumeram-se algumas dessas sugestões:

- Som a acompanhar e explicar as diversas fases da simulação:

“Se calhar uma voz a descrever o que se passava... A explicar de uma forma simples mas a explicar bem” (E1).

- Um comando do tipo “PAUSE” que permita parar e/ou correr a simulação mais devagar:

“Acho que a dúvida é ver o movimento de cargas quando se formam os dipolos induzidos. É por isso que acho que devia haver um “pause” para uma pessoa perceber melhor o movimento de cargas” (E4).

- Representação diferente para as moléculas:

“Não tanto tridimensionalmente, mas dando, mostrando que é uma molécula mesmo, que não é... que dá o aspecto de ser uma espécie de um átomo e depois uma pessoa olha para o lado, molécula apolar” (E5).

- Inclusão de mais duas moléculas no início da simulação:

“O único aspecto que encontro mais coiso é logo no início da simulação. Aparece uma molécula e dessa molécula aparecem três, quer dizer acho que deviam começar logo as três, um conjunto de moléculas que existem, numa delas formou-se um dipolo instantâneo e as outras seriam os induzidos, que é para as pessoas também não começarem a pensar “Então, de onde é que vieram aquelas duas?”; “Vieram daquela?”. Pronto, é uma questão”(E6).

Algumas destas sugestões foram tomadas em consideração, sendo aproveitadas para a melhoria da simulação, tornando-a mais interactiva e capaz de proporcionar ao utilizador não só uma explicação global do fenómeno, como também de cada uma das suas fases.

Alguns aspectos continuam, no entanto, a denotar dificuldades de assimilação e compreensão:

- O não reconhecimento da necessidade de formação de dipolos para que seja possível a ligação. Novamente, existe uma situação em que se pode afirmar que a compreensão do fenómeno está incompleta. Alunos há que explicam (uns melhor que outros) a formação dos dipolos (instantâneos e induzidos), mas são incapazes de reconhecer que estes têm que se formar para poder haver ligação entre moléculas que são apolares. A maioria apenas reconhece a sua necessidade após alguma insistência um pouco “forçada” pela entrevista. Isto leva a propor que qualquer ensino relativo a ligações intermoleculares deve dar ênfase ao conceito de dipolo e à necessidade de existirem dipolos para haver ligação. Há, no entanto, que fazer *mea culpa* e reconhecer que a pergunta formulada (“Por que é que se formam dipolos?”) talvez não fosse muito clara nesse sentido, uma vez que a maioria dos alunos respondeu com base no movimento aleatório dos electrões. Num hipotético estudo futuro, se este aspecto for investigado, a questão deverá ser reformulada com outro enunciado menos ambíguo.
- A confusão entre ligação química (intramolecular) e ligação intermolecular: ambas feitas à custa de electrões partilhados. A resolução e esclarecimento desta ideia passará mais por outras estratégias (distinção em termos de conceito, de energias de ligação, etc) do que propriamente pela simulação.
- A expressão “concentração de electrões” para referir “acumulação momentânea de electrões”, aquando da formação do dipolo instantâneo. Esta expressão até poderá ser aceitável desde que se explicita muito bem o seu significado, tendo o cuidado de a distinguir do conceito de concentração que é utilizado a propósito de soluções.

Há, ainda, alguns aspectos reveladores de dificuldades que foram detectados e que, no entanto, não foi possível explorar se foram ou não superados. Tal não foi possível por razões que se prenderam com a necessidade de cumprimento do programa, não se tendo sobrecarregado os alunos com entrevistas. Estas dificuldades e ideias erradas podem ser enumeradas:

- Formação de dipolos por transferência de electrões, isto é, os dipolos induzidos formam-se retirando electrões a outro dipolo.
- Confusão entre dipolos instantâneos (moléculas apolares) e dipolos permanentes (referência à água): são a mesma coisa.
- O dipolo instantâneo provoca a repulsão de electrões no dipolo induzido e a sua transferência. Desta forma, a molécula induzida, o dipolo induzido, ficaria com menos electrões do que inicialmente, antes da polarização.
- Associação de ligação instantânea ao dipolo instantâneo: por causa de o dipolo instantâneo ser momentâneo, a ligação entre as moléculas (intermolecular) seria igualmente instantânea.

Dado o elevado número de ideias erradas e mal assimiladas, certamente não faltará trabalho a fazer no que respeita à ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido, podendo ser interessante a investigação destas lacunas e formas de as superar. Estes aspectos devem merecer, por parte de quem lecciona, toda a atenção, no sentido de prevenir o seu aparecimento nas mentes dos alunos. Tal pode passar por interrogar-se os alunos aquando do ensino destes conceitos, procurando sondar os motivos por que aparecem, explorando estes e outros aspectos que possam suscitar problemas de interpretação e compreensão.

Em termos de ensino e aprendizagem, a simulação tem as virtudes já identificadas. Apesar disso, jamais será capaz de resolver e esclarecer muitas das dificuldades e dúvidas identificadas, as quais poderão, e deverão, ser ultrapassadas pela acção dos professores.

Capítulo 6

Conclusões

6- Conclusões

Antes de quaisquer conclusões, convém lembrar que, qualquer que seja o tipo de pesquisa e sua dimensão, há sempre limitações nas conclusões e generalizações que dela se podem extrair. A não aleatoriedade e o reduzido número de sujeitos que participaram nos estudos condicionam quaisquer generalizações que se possam fazer. No entanto, podem dar indícios e indicações válidas, o que permite sintetizar algumas ideias. Neste sentido, em estudos futuros, recomenda-se uma maior representatividade e selecção aleatória dos sujeitos como forma de conferir maior validade aos estudos.

Relativamente às hipóteses iniciais, as simulações *on-line* revelaram as suas qualidades na compreensão de fenómenos que suscitam dúvidas e se revelam complexos aos “olhos” dos alunos. Os fenómenos em questão, pelas suas características, tornam-se difíceis de visualizar, logo de compreender, apenas com base em representações estáticas. É nestes domínios que as simulações poderão ter o seu campo de acção privilegiado.

No estudo levado a cabo com alunos do 9º ano, foi evidenciada uma melhor prestação do grupo experimental sujeito a um ensino que incluía o recurso a simulações *on-line*. Subsistem, no entanto, lacunas relativamente à compreensão da polaridade molecular, evidenciadas pelo reduzido número de alunos a responder à questão aberta, de desenvolvimento. Propõe-se, assim, uma atenção acrescida a este aspecto, no sentido de que as causas destes problemas sejam investigadas e entendidas, servindo como ponto de partida para o desenvolvimento de novos modelos de ensino e aprendizagem que permitam que a “mensagem” seja integrada.

A possibilidade de incluir ligações contendo questões de auto-avaliação de escolha múltipla, com explicações e representações simbólicas e um ícone com uma “caixa de sugestões” para os utilizadores indicarem hipóteses de aperfeiçoamento da simulação são apenas alguns exemplos em aberto para desenvolvimento futuro. Igualmente está em estudo a possibilidade de, a partir destas simulações, se problematizar a miscibilidade / não miscibilidade, igualmente com animações e simulações computacionais. Esta extensão seria a continuidade do trabalho anterior, “trampolim” para a compreensão da miscibilidade molecular. Interpretação da miscibilidade água / acetona ou da imiscibilidade água / hexano são apenas alguns exemplos da evolução e o aproveitamento deste trabalho. Parte deste trabalho já foi realizado, estando disponíveis alguns vídeos relativos a misturas em <http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/index.html>.

Interessante seria, igualmente, a possibilidade de voltar a fazer um estudo deste género junto dos mesmos alunos daqui a 2 - 3 anos, cuja intenção primordial seria a de verificar “o

que ficou” deste trabalho. Sabe-se que o tempo faz esquecer muita coisa e, por isso, teria interesse ver que “resíduo” ficou nos alunos. A ideia até parece exequível dado que muitos dos alunos envolvidos optaram, no 10º ano, pelo 1º agrupamento (Estudos Científico-Naturais), continuando a ser alunos do autor da presente dissertação.

Com o estudo levado a cabo no 12º ano ficaram igualmente evidenciadas as potencialidades da simulação utilizada. Aspectos considerados complexos e de difícil compreensão pelos alunos foram facilitados pela mesma. A movimentação de cargas aquando da formação dos dipolos induzidos e o dinamismo do processo fornecem indicações preciosas das capacidades da simulação. Apesar de todas as alterações sugeridas pelos alunos envolvidos no estudo, uma hipótese de desenvolvimento no sentido do aperfeiçoamento da simulação passará por incluir, tal como no caso anterior, uma “caixa de sugestões” para os utilizadores.

Tal como anteriormente, a essência da questão não foi plenamente conseguida. A maioria dos alunos não associa a necessidade de formação de dipolos para ser possível a ligação em moléculas apolares. Explicam, uns melhor que outros, a formação dos dipolos (quer instantâneos, quer induzidos), mas não reconhecem a necessidade de estes se formarem. Sugere-se, por isso, que qualquer ensino relativo a ligações intermoleculares deve começar por dar ênfase ao conceito de dipolo no contexto das ligações entre moléculas. Outros aspectos ficaram igualmente por esclarecer e, até, bastante mal assimilados. Sendo a temática das ligações intermoleculares pouco estudada e investigada (relativamente a outros conceitos de Química), parece haver muito trabalho a fazer na compreensão das dificuldades e na sua superação em termos de estratégias adequadas.

Em termos de ensino e aprendizagem de Química, estes dois casos sugerem que as simulações *on-line* podem contribuir para a aprendizagem de conceitos de Química que são particularmente difíceis de visualizar. Os estudos mostram que quando os alunos recebem uma instrução contendo representações pictóricas ao nível microscópico, são mais capazes de responder a questões conceptuais relacionadas com o fenómeno (Noh e Scharmann, 1997; Sanger, 2000). Neste sentido, a utilização de simulações, cada vez mais acessíveis *on-line*, deve ser fomentada na sala de aula, sobretudo quando se abordam, pela primeira vez, assuntos novos e de compreensão difícil.

Por consulta da literatura, muitos estudos sobre o uso das simulações computacionais apontam no sentido da sua grande utilidade e das suas potencialidades em termos de ensino e aprendizagem de Química (Russell *et al*, 1997; Sanger e Badger, 2001; Zare, 2002). Convém,

no entanto, não esquecer que o uso dos computadores e de simulações computacionais não é, de modo algum, uma panaceia capaz de resolver todos os problemas pedagógicos (nomeadamente, um certo facilitismo, fruto de um ensino massificado), cuja resolução poderá até passar mais por reabilitar algumas práticas pedagógicas mais tradicionais como a exigência, o rigor, o trabalho e a disciplina (Paiva, 2000) do que pela utilização dos computadores. Poderão e deverão ser mais uma ferramenta ao serviço do professor, tal como é, por exemplo, o trabalho laboratorial / experimental, essencial (por ser a génese do trabalho científico) para despertar a curiosidade, os “porquês”, o “por que é que acontece?”, que podem ser o ponto de partida para se gostar de estudar e aprender Química.

Convém, até, salientar a pertinência do uso ou não de simulações, havendo outros “caminhos”, eventualmente melhores. Seja o exemplo do estudo do efeito da variação da concentração de um reagente na velocidade de uma reacção química. Uma simulação poderá imitar o fenómeno muito bem; no entanto, a realização de uma actividade experimental servirá melhor para o que se pretende. Outro exemplo é o da confusão entre calor e temperatura. Muitos alunos consideram, erradamente, que sensações diferentes de “frio” e “quente” significam temperaturas diferentes (Thomaz *et al*, 1994; Harrison *et al*, 1999). Uma simulação dificilmente conseguirá alterar esta ideia, ao passo que trabalho laboratorial conseguirá de modo relativamente simples “desmontar” as sensações tácteis dos alunos. Igualmente, uma simulação de uma titulação de ácido-base, por melhor concebida que esteja, dificilmente substituirá a titulação propriamente dita. A medição do titulado, a adição de titulante, a detecção do ponto de equivalência pela mudança de cor do indicador são mais facilmente vistos e compreendidos fazendo a titulação e não por outra forma.

Já no caso estudado no 12º ano, dificilmente haverá possibilidade de visualização e compreensão melhor do que através de uma simulação. É praticamente impossível reproduzir o fenómeno em causa de outra forma. Uma simulação deve, ainda, ser usada com algum “tacto”. No caso concreto estudado no 9º ano, seria contraproducente a simulação sem a visualização prévia do fenómeno real. Sugere-se, até, que, neste caso, não seja utilizada a simulação sem que os alunos tenham visto ou, de preferência, realizado a actividade na realidade, que, esta sim, levará às interrogações, a querer saber “por que é que é assim?”, “por que é que isto acontece?”, “por que é a água atraída por uma régua electrizada e o hexano não o é?”. Deve haver um uso adequado e equilibrado das simulações (usar sem abusar), complementado por outras estratégias de ensino, nomeadamente actividade laboratorial e/ou experimental ou com a exploração de representações pictóricas explicativas dos fenómenos. Só assim se poderá conseguir uma compreensão genuína e a revelação da beleza da Química.

O papel do professor, entretanto, será cada vez mais o de um orientador do trabalho do aluno, ajudando-o a distinguir o essencial do acessório, a desenvolver o gosto pelo saber e pelo conhecimento, fomentando a formação de cidadãos capazes de pensar por si e de aprender a aprender, um aspecto cada vez mais necessário numa aldeia global onde a informação se processa “à velocidade da luz”.

Cada vez mais serão necessários conhecimentos sobre as tecnologias da informação e comunicação e sobre a utilização dos computadores qualquer que seja o sector de actividade. No ensino, o seu uso actual é manifestamente insuficiente, além de que a sua utilização não seja a mais adequada, pedagógica e cientificamente (Paiva, 2002). Persiste uma espécie de “barreira de energia de activação”, a qual poderá ser vencida apenas com uma mudança de atitudes e de mentalidades. Parece haver a necessidade de alguma divulgação, de formação e dir-se-ia até de “propaganda” para que os computadores deixem de ser qualquer coisa de estranho no ensino. O ensino, como se tem vindo a acentuar, não deverá escapar a esta “fatalidade”, e aos professores vai ser exigido, cada vez mais, o saber lidar e trabalhar com computadores, pondo-os de uma forma útil e construtiva ao serviço do ensino e da aprendizagem. Deste modo, não só se poderá explorar uma ferramenta de inegável valor acrescentado, como igualmente, ao permitir o envolvimento dos alunos com estas tecnologias, se estará a preparar cidadãos para o futuro, onde a necessidade de fazer uso das tecnologias será (já o é, aliás) uma constante. Pelo que se expôs, no ensino das ciências em geral e da Química em particular, a utilização das tecnologias da informação pode desempenhar um papel de relevo dadas as suas potencialidades.

Com o continuado desenvolvimento da informática e da sociedade da informação, uma das tendências, nos próximos tempos, será, sem dúvida, para simulações *on-line* e em tempo real (Trindade e Fiolhais, 2000; Trindade, Paiva e Fiolhais, 2001). Há, inclusive, estudos / investigações sobre assuntos de Química avaliados através da *Internet* com simulações interactivas com *feedback* aos utilizadores (Own e Wong, 2000). Novamente, aos professores será exigido manterem-se a par das novidades tecnológicas postas ao dispor na rede e de todo o manancial de potencialidades por ela oferecida. Caso contrário, arriscam-se a deixar de poder ser contemporâneos do seu próprio presente, abandonando uma ferramenta de inegáveis recursos e privando os seus alunos de experiências enriquecedoras. Uma das suas funções primordiais será, igualmente, a de ajudar a fazer a triagem da informação que circula na rede, muita da qual sem qualquer valor científico.

Uma questão angustiante que se poderá colocar é “Será que os computadores poderão vir a substituir os professores?”. Tal parece muito pouco provável. Um professor é (ou deve ser) muito mais que uma mera fonte de conhecimentos. Há todo um conjunto de atributos que um professor possui e que um computador não: a componente afectiva, a relação entre pessoas, as possibilidades de comunicação e de partilha de experiências são componentes do processo educativo essenciais para o acto de ensinar e aprender. No entanto, subscreve-se a opinião de Lower (1997) quando afirma “Qualquer professor que *possa* ser substituído por um computador *deveria* sê-lo” (pp 370).

Entretanto, subsiste um “dilema” cuja resolução nem sempre é pacífica. Muitos educadores encaram a resolução de problemas quase como exclusiva para se ter sucesso em Química (Nurrenbern e Pickering, 1987). Alguns até consideram que ensinar a resolução de problemas é equivalente a ensinar conceitos de Química (Sawrey, 1990). Por um lado, é essencial que os fundamentos da Química, o que está por trás do que acontece, “os porquês”, sejam esclarecidos e sejam apreendidos. Por outro lado, não é raro que, na prática, a teoria não seja bem assim. Caso paradigmático é o que se passa ao nível do nosso Ensino Secundário, com particular incidência no 12º ano. O que *realmente conta* (aos “olhos” dos pais e encarregados de educação, da comunidade e, até, das instâncias do Estado) é cumprir programas e preparar, e bem, os alunos para exames (com *rankings* públicos apoiados em critérios no mínimo discutíveis), podendo-se descurar pormenores que são a essência da Química e ensinando basicamente para a resolução de problemas. O desafio que se coloca aos professores é serem capazes de conciliar este dilema, ensinar e tornar a Química acessível, por um lado, e manter níveis de exigência elevados, por outro. O desafio não parece fácil mas, por isso mesmo, é aliciante.

Bibliografia

Bibliografia

- Ahtee, M.; Varjola, I. (1998). Students' understanding of chemical reaction. *International Journal of Science Education*, 20, 3, 305 – 316.
- Aido, A.; Ponte, M. A. P.; Martins, M. A.; Bastos, M. G. A.; Pereira, M. J.; Leitão, M. M.; Carvalho, R. (1983). *Física para o 11º ano de escolaridade / Curso complementar*. Lisboa, Livraria Sá da Costa Editora.
- Atkins, P. (1998). *Physical Chemistry*. Oxford University Press.
- Atkins, P.; Jones, L. (2000). *Chemical Principles. The quest for insight*. New York, Freeman.
- Ayas, A.; Demirbas, A. (1997). Turkish secondary students' conceptions of introductory chemistry concepts. *Journal of Chemical Education*, 74, 5, 518 – 521.
- Balieiro, S. (2002). Anime o seu site com Flash. *Exame informática*, 83, 98 – 99.
- Barker, V.; Millar, R. (2000). Students' reasoning about basic chemical thermodynamics and chemical bonding: what changes occur during a context-based post-16 chemistry course? *International Journal of Science Education*, 22, 11, 1171 – 1200.
- Barker, V. (1999). Students' reasoning about chemical reactions: what changes occur during a context-based post-16 chemistry course? *International Journal of Science Education*, 21, 6, 645 – 665.
- Birk, J. P.; Kurtz, M. J. (1999). Effect of experience on retention and elimination of misconceptions about molecular structure and bonding. *Journal of Chemical Education*, 76, 1, 124 – 128.
- Bourque, D. R.; Carlson, G. R. (1987). Hands-on versus computer simulation methods in chemistry. *Journal of Chemical Education*, 64, 3, 232 – 234.
- Brown, A. (1999). Simulated classrooms and artificial students: The potencial effects of new technologies on teacher education. *Journal of Research on Computing in Education*, 32, 2, 307 – 318.
- Caldeira, M. H.; Martins, D. R. (1990). Calor e temperatura. Que noção têm os alunos universitários destes conceitos? *Gazeta de Física*, 13, 2, 85 – 94.
- Camilli, G.; Bulkley, K. (2001). Critique of "An evaluation of the Florida A-plus accountability and school science choice program".
In <http://epaa.asu.edu/epaa/v9n7/> (29-11-2002)
- Carter, C. S.; Brickhouse, N. W. (1989). What makes chemistry difficult? Alternate perceptions. *Journal of Chemical Education*, 66, 3, 223 – 225.
- Carvalho, A. A. A. (1999). *Os hipermedia em contexto educativo*. Braga, Universidade do Minho.
- Chang, R. (1991). *Chemistry*. McGraw Hill.

Chang, R. (2000). *Physical Chemistry for the Chemical and Biological Sciences*. Sansalito, University Scientific Books.

Clavel, M. C.; Duarte, M. C. (1997). As novas tecnologias de informação no ensino da Química: Proposta de uma aplicação de *software hipermedia* para o estudo da "Constituição da matéria" no 8º ano. *Química*, 67, 25 – 30.

Cohen, L.; Manion, L. (1994). *Research methods in education*. New York, Routledge.

Cox, M. J. (1992). The computer in the science curriculum. *International Journal of Educational Research*, 17, 1, 19 – 35.

Cullen, Jr, J. F. (1989). Computer simulation of chemical equilibrium. *Journal of Chemical Education*, 66, 12, 1023 – 1025.

Donovan, W. J.; Nakhleh, M. B. (2001). Students' use of web-based tutorial materials and their understanding of chemistry concepts. *Journal of Chemical Education*, 78, 7, 975 – 980.

Friedler, Y.; Nachmias, R.; Linn, M. C. (1990). Learning scientific reasoning skills in microcomputer-based laboratories. *Journal of Research in Science Teaching*, 27, 2, 173 – 191.

Furió, C.; Catalayud, M. L. (1996) Difficulties with the geometry and polarity of molecules. Beyond misconceptions. *Journal of Chemical Education*, 73, 1, 36 – 41.

Gates, B. (1999). *Negócios @ velocidade do pensamento*. Lisboa, Temas & Debates.

Gil, V. M. S. (2001). *Química 12º ano*. Lisboa, Plátano Editora.

Glass, G. V.; Hopkins, K. D. (1984). *Statistical methods in education and psychology*. Boston, Allyn and Bacon.

Hameed, H.; Hackling, M. W.; Garnett, P. J. (1993). Facilitating conceptual change in chemical equilibrium using a CAI strategy. *International Journal of Science Education*, 15, 2, 221 – 230.

Harrison, A. G.; Grayson, D. J.; Treagust, D. F. (1999). Investigating a grade 11 student's evolving conceptions of heat and temperature. *Journal of Research in Science Teaching*, 36, 1, 55 – 87.

Horton, C. (2001). Student preconceptions and misconceptions in chemistry. Integrated physics and chemistry modelling workshop.
[Inhttp://216.239.35.100/search?q=cache:rdKT8Q5UXXgC:www.daisley.net/hellevator/misconceptions/misconceptions.pdf+misconceptions+intermolecular+forces&hl=pt&ie=UTF-8](http://216.239.35.100/search?q=cache:rdKT8Q5UXXgC:www.daisley.net/hellevator/misconceptions/misconceptions.pdf+misconceptions+intermolecular+forces&hl=pt&ie=UTF-8) (05-09-2002)

Joolingen, W. (1999). Cognitive tools for discovery learning. *International Journal of Artificial Intelligence in Education*, 10, 385 - 397.

Lower, S. K. (1997). Computer-assisted instruction in Chemistry. In *Using computers in chemistry and chemical education*, pp 355 – 376. Washington, American Chemical Society. Edited by Theresa Julia Zielinski and Mary L. Swift.

Ludke, M.; André, M. (1986). *Pesquisa em educação: abordagens qualitativas*. São Paulo: Editora Pedagógica Universitária LTDA.

Martins, A.; Malaquias, I.; Martins, D. R.; Campos, A. C.; Lopes, J. M.; Fiúza, E. M.; Silva, M. M. F.; Neves, M.; Soares, R. (2002). *Livro branco da Física e da Química. Diagnóstico 2000. Recomendações 2002*. Lisboa, Sociedade Portuguesa de Física / Sociedade Portuguesa de Química.

Miller, L.; Olson, J. (1994). Putting the computer in its place: a study of teaching with technology. *Journal of Curriculum Studies*, 26, 2, 121 – 141.

Nakhleh, M. B. (1992). Why some students don't learn chemistry. Chemical misconceptions. *Journal of Chemical Education*, 69, 3, 191 – 196.

Nakhleh, M. B. (1993). Are our students conceptual thinkers or algorithmic problem solvers? Identifying conceptual students in general chemistry. *Journal of Chemical Education*, 70, 1, 52 – 55.

Nakhleh, M. B.; Mitchell, R. C. (1993). Conceptual learning versus problem solving - There is a difference. *Journal of Chemical Education*, 70, 3, 190 – 192.

Negroponte, N. (1995). *Being digital*. London, Hodder & Stoughton.

Nicoll, G. (2001). A report of undergraduates' bonding misconceptions. *International Journal of Science Education*, 23, 7, 707 – 730.

Noh, T.; Scharmann, L. C. (1997). Instructional influence of a molecular-level pictorial presentation of matter on students' conceptions and problem-solving ability. *Journal of Research in Science Teaching*, 34, 2, 199 – 217.

Nurrenbern, S. C.; Pickering, M. (1987). Conceptual learning versus problem solving: Is there a difference? *Journal of Chemical Education*, 64, 6, 508 – 510.

Ogude, N. A.; Bradley, J. D. (1996). Electrode processes and aspects relating to cell EMF, current and cell components in operating electrochemical cells. Precollege and college student interpretation. *Journal of Chemical Education*, 73, 12, 1145 – 1149.

Oliveira, P. M. (2002). Flash MX. *Exame Informática*, 83, 42 – 43.

Oxtoby, D. W.; Hachtrieb, N. H. (1990). *Principles of Modern Chemistry*. Saunders College Publishing.

Own, Z.; Wong, K. P. (2000). The application of scaffolding theory on the elemental school acid-base chemistry web. *ICCE / ICCAI*, 1, 603 – 607.

Pacheco, P. A. (2001). *Estudo da influência da representação gráfica de resultados científicos no desempenho dos alunos*. Dissertação de mestrado. Departamento de Química, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.

Paiva, J. (2002). *As tecnologias da informação e comunicação: Utilização pelos professores (dados relativos a 2001 – 2002)*.
In <http://nautilus.fis.uc.pt/cec/estudo> (1-12-2002)

Paiva, J. C. M. (2000). *Ensino do equilíbrio químico: subtilezas e simulações computacionais*. Tese de doutoramento, Universidade de Aveiro.

Paiva, J. C.; Gil, V. M. S.; Fiolhais, C. (2000). “Softciências”- Um consórcio para promover o uso das tecnologias informáticas no ensino das ciências. *Química*, 78, 42 – 47.

Papert, S. (1994). *A máquina das crianças. Repensando a escola na era da informática*. Porto Alegre, Artes Médicas.

Pardal, L.; Correia, E. (1995). *Métodos e técnicas de investigação social*. Porto, Areal Editores.

Pereira, A.; Camões, F. (1998). *Química 12º ano*. Lisboa, Texto Editora.

Peterson, R. F.; Treagust, D. F. (1989). Grade-12 students’ misconceptions of covalent bonding and structure. *Journal of Chemical Education*, 66, 6, 459 - 460.

Peterson, R. F.; Treagust, D. F.; Garnett, P. (1989). Development and application of a diagnostic instrument to evaluate grade-11 and -12 students’ concepts of covalent bonding and structure following a course of instruction. *Journal of Research in Science Teaching*, 26, 4, 301 – 314.

Programa de Ciências Físico-Químicas 9º ano (1994). Lisboa, Departamento do Ensino Básico.

Programa de Química 12º ano (1995). Lisboa, Departamento do Ensino Secundário.

Russell, J. W.; Kozma, R. B.; Jones, T.; Wykoff, J.; Marx, N.; Davis, J. (1997). Use of simultaneous-synchronized macroscopic, microscopic and symbolic representations to enhance the teaching and learning of chemical concepts. *Journal of Chemical Education*, 74, 3, 330 – 334.

Russo, S.; Silver, M. (2000). *Introductory Chemistry*. Adisson Wesley Longman.

Sanger, M. J. (2000). Using particulate drawings to determine and improve students’ conceptions of pure substances and mixtures. *Journal of Chemical Education*, 77, 6, 762 – 766.

Sanger, M. J.; Badger, S. M. (2001). Using computer-based visualization strategies to improve students’ understanding of molecular polarity and miscibility. *Journal of Chemical Education*, 78, 10, 1412 – 1416.

- Sanger, M. J.; Greenbowe, T. J. (1997). Students' misconceptions in electrochemistry: Current flow in electrolyte solutions and the salt bridge. *Journal of Chemical Education*, 74, 7, 819 – 823.
- Sanger, M. J.; Phelps, A. J.; Fienhold, J. (2000). Using a computer animation to improve students' conceptual understanding of a can-crushing demonstration. *Journal of Chemical Education*, 77, 11, 1517 – 1520.
- Sawrey, B. A. (1990). Concept learning versus problem solving: revisited. *Journal of Chemical Education*, 67, 3, 253 – 254.
- Smith, K. J.; Metz, P.A. (1996). Evaluating student understanding of solutions chemistry through microscopic representations. *Journal of Chemical Education*, 73, 3, 233 – 235.
- Thomaz, M. F.; Malaquias, I. M.; Valente, M. O.; Antunes, M. J. (1994). Uma tentativa para ultrapassar concepções alternativas sobre calor e temperatura. *Gazeta de Física*, 17, 3, 10 – 17.
- Tipler, P. (1995). *Física- Electricidade e Magnetismo*. Rio de Janeiro, Guanabara Koogan.
- Toffler, A. (2000). *A terceira vaga*. Lisboa, Livros do Brasil.
- Trindade, J.; Fiolhais, C. (2000). Using virtual environments for studying water phases and phase transitions. *ICCE / ICCAI*, 1, 413 – 416.
- Trindade, J.; Paiva, J.C.M.; Fiolhais, C. (2001). Visualising molecules: on-line simulations and virtual reality. *Europhysics News*, January/February, 14 – 15.
- Trochim, W. (2002). *Regression to the mean*.
In <http://trochim.human.cornell.edu/kb/regmean.htm> (7-11-2002)
- Turner, K. E. (1990). A supplemental course to improve performance in introductory chemistry. *Journal of Chemical Education*, 67, 11, 954 – 957.
- Tyson, L.; Treagust, D. F.; Bucat, R. B. (1999). The complexity of teaching and learning chemical equilibrium. *Journal of Chemical Education*, 76, 4, 554 – 558.
- Vermulapalli, G. K.; Kukolich, S. G. (1996). Why does a stream of water deflect in an electric field? *Journal of Chemical Education*, 73, 9, 887 – 888.
- Villate, J. E. (1999). *Electromagnetismo*. Amadora, McGraw Hill.
- Williamson, V. M.; Abraham, M. R. (1995). The effects of computer animation on the particulate mental models of college chemistry students. *Journal of Research in Science Teaching*, 32, 5, 521 – 534.
- Yarroch, W. L. (1985). Student understanding of chemical equation balancing. *Journal of Research in Science Teaching*, 22, 5, 449 – 459.
- Zare, R. N. (2002). Visualizing Chemistry. *Journal of Chemical Education*, 79, 11, 1290 – 1291.

Consultas na *Internet*

<http://tek.sapo.pt/comp> (5-12-2002)

<http://www.pcmag.com> (5-12-2002)

<http://www.nunoportugal.com/microlusa/histcomp/comp.htm> (17-07-2001)

<http://members.ud.com/projects/cancer/index.htm> (5-11-2002)

<http://www.nobel.se/chemistry/laureates/1998/index.html> (5-11-2002)

<http://soulcatcher.chem.umass.edu/cgi-bin/pickPage.cgi?downloads.html> (5-12-2002)

<http://www.glenbrook.k12.il.us/gbssci/phys/Class/estatics/u811e.html> (7-12-2002)

Glossário

Glossário

ADSL (*Asymmetrical Digital Subscriber Line*): Variante da tecnologia *DSL*, banda larga via linha telefónica, em que a velocidade de recepção de informação e de *download* é, em média, três a quatro vezes superior à de envio de informação e de *upload*. Opõe-se ao *SDSL* (*Symmetrical Digital Subscriber Line*).

Amplitude de banda: Quantidade de informação digital que um sistema de comunicação pode transportar.

BBS (*Bulletin Board System*): Sistema electrónico para partilha de informação que, tipicamente, está ligado à *Internet*. Os utilizadores, com interesses comuns, podem propor e ler mensagens, entrar em *chats*, comunicar entre si por correio electrónico, aceder a listas de conteúdos, *etc.*

Bit (*Binary digit*): Um 1 ou 0 na linguagem binária. Todos os números, dados e instruções são representados por uma sucessão destes dois *bits*.

Browser: Programa que permite aceder e manipular toda a informação disponível na *Internet* (texto, som, vídeo, imagem, *etc.*). Os *browsers* mais comuns são o *Internet Explorer* (da *Microsoft*) e o *Netscape*.

Byte: Unidade de armazenamento equivalente a 8 *bits*. A quantidade de memória e a capacidade de armazenamento de um computador exprime-se geralmente em *megabytes* (MB, 10^6 bytes) e em *gigabytes* (GB, 10^9 bytes), respectivamente.

CAL (*Computer Assisted Learning*): Aprendizagem assistida por computador.

CD-ROM (*Compact Disk Read Only Memory*): Unidade com grande capacidade de informação (cerca de 700 *megabytes*). Ao contrário do significado da raiz do seu nome já é possível, hoje, escrever e gravar informação num CD-ROM, e não apenas lê-la.

CHAT: Abreviatura de IRC (*Internet Relay Chatting*), potencialidade para “conversas com o teclado”, em tempo real.

Cliente: Computador que acede à informação disponibilizada noutro computador remoto (o servidor).

CMC (*Computer Mediated Communication*): Comunicação mediada por computador.

CSCL (*Computer Supported Collaborative Learning*): Aprendizagem colaborativa auxiliada por computador.

CSCW (*Computer Supported Collaborative Work*): Trabalho colaborativo auxiliado por computador.

Download: Acto de capturar um ficheiro de um computador remoto (servidor) para o próprio computador (cliente). As páginas da *Internet* estão recheadas de ficheiros que permitem facilmente fazer *download*.

DVD (*Digital Video Disc*): O “equivalente ao CD-ROM” para informação vídeo, com maior capacidade de informação (cerca de 5 *gigabytes*).

Email (*Electronic mail*): Correio electrónico. Equivalente ao correio clássico com as vantagens de ser mais rápido, facilitar o envio anexo de ficheiros de texto ou figuras, permitir o envio fácil de mensagens de um utilizador para muitos e de muitos para um.

Fibra óptica: Material de fibra de vidro ou outro material capaz de transportar raios de luz que, uma vez modelados, representam grande quantidade de informação.

FTP (*File Transfer Protocol*): É o protocolo para permuta de ficheiros entre computadores ligados entre si. O próprio programa que permite essa troca de ficheiros tomou o nome de *FTP*.

Hardware: Conjunto de equipamentos e dispositivos físicos de um computador.

Hiperligação (*hyperlink*): Ligação entre um elemento de um documento electrónico (palavra, imagem, *etc*) com outro elemento do mesmo ou de outro documento electrónico. Usam-se também os termos hipertexto (*hypertext*) ou hipermédia (*hypermedia*) quando os elementos em causa são texto, no primeiro caso, ou imagem, som, *etc*, no segundo caso.

Hipertexto: Documento constituído por texto, imagens e ligações que, quando seleccionados, possibilitam a visualização de outras partes do documento ou até de documentos diferentes, podendo o utilizador escolher o caminho a percorrer no hipertexto.

HTML (*HiperText Markup Language*): A extensão mais comum dos ficheiros legíveis na *Internet*, usando um vulgar *browser*.

HTTP (*Hyper Text Transfer Protocol*): Protocolo de comunicação entre computadores ligados pela *Internet*. Em particular, este protocolo permite a transferência universal de material digital em hipertexto.

ICT (*Information and Communication Technologies*): Tecnologias de informação e comunicação.

Ícones: Pequenas imagens representando aplicações, dispositivos e documentos que, pela sua aparência, sugerem a sua utilidade.

Internet: Rede mundial de computadores ligados entre si, que partilham informação.

Link: Ligação. Num documento *HTML* ou num hipertexto identifica-se como uma palavra sublinhada ou em destaque que indica um ponto de ligação a outra informação.

Mailing list: Também designado por “*discussion group*”, trata-se de uma lista de subscritores com interesses comuns que se inscrevem para receber regularmente informação importante por correio electrónico, participar em “debates *on-line*”, etc.

Modem (*Modulator / demodulator*): Dispositivo que transforma, envia e recebe dados capazes de ser apreendidos pelo computador, ou via linha telefónica (*modem* convencional) ou via cabo coaxial (*modem* por cabo). O segundo é muito mais eficaz do que o primeiro.

Multimédia: Conjunto de potencialidades de informação digital e programas de computador, sob a forma de textos, gráficos, som, imagens e vídeo.

Network: Rede de computadores ligados que partilham informação e periféricos.

On-line: Significa “ligado à rede” e, assim, capaz de aceder a toda a informação disponível na *Internet*. Opõe-se a esta expressão o conceito de *off-line*.

Portal (*Portal site*): Local da *Internet* que constitui o ponto de partida - a porta - de um utilizador. Mediante a utilização de palavras-chave ou através de um menu prévio, o utilizador procura a informação.

Projector vídeo: projector muito potente, semelhante a um projector de *slides*, que se pode ligar a um vídeo, câmara de vídeo ou a um computador projectando o sinal destes.

RAM (Random Access Memory): Memória de acesso aleatório; armazena dados e instruções enquanto o computador se encontra ligado, desaparecendo quando se desliga.

RDIS: Rede Digitalizadora Integradora de Serviços. Permite a ligação directa dos seus utilizadores a uma rede telefónica digital sem necessidade de um *modem*.

ROM (Read Only Memory): Memória só de leitura. Série de instruções que determinam o funcionamento de um computador.

Scanner: Digitalizador, dispositivo que funciona como um pequeno fotocopador cuja imagem é disponibilizada no ecrã do computador, podendo ser tratada e armazenada.

SDSL (Symmetrical Digital Subscriber Line): Variante da tecnologia *DSL*, banda larga via linha telefónica, em que a velocidade de recepção de informação e de *download* é, em média, igual à de envio de informação e de *upload*.

Sensor: Equipamento ligado ao computador que nele regista medições várias do meio (som, movimento, temperatura, *etc*). Muito usado, em termos de ensino, como interface para apoio a experiências no laboratório.

Servidor: Computador potente centro de várias *networks*. O computador servidor controla o acesso às redes e aloja páginas *Web*.

Simulações: Programas que reproduzem fenómenos no computador. Tais fenómenos, em muito casos, seriam dificilmente observáveis e manipuláveis na realidade, por dizerem respeito a ocorrências que se dão no domínio do muito grande, do muito pequeno, do muito rápido / lento, do muito perigoso, do muito dispendioso, *etc*.

Site: Um *site* da *Internet* é um dos nós / computadores que armazenam páginas *HTML*. É frequentemente usado como sinónimo de um conjunto de páginas.

Software: Conjunto de programas que executam determinadas tarefas.

TCP/IP (Transfer Control Protocol / Internet Protocol): Conjunto de protocolos da *Internet* que definem e controlam as comunicações entre os diversos computadores.

TIC: Tecnologias de Informação e Comunicação.

URL (*Uniform Resource Locator*): Endereço de um *site* da *Internet*. Por exemplo, o *URL* da Universidade do Porto é www.up.pt.

Videoconferência: Conferência entre dois ou mais utilizadores, via *Internet* ou através de linha telefónica com largura de banda larga, onde o sinal vídeo tem papel importante. Cada posto de emissão tem associado ao computador um microfone e uma câmara vídeo, que permite a captura (para emissão) de imagens e som.

Vírus: Pedaco de código próprio de computador concebido para ser transmitido de máquina em máquina sem que o utilizador disso se aperceba, aconselhando-se o uso de programas de detecção (anti-vírus) de modo a preveni-los.

Web pages / Web site: Conjunto de páginas com informação digital (texto, imagem, som, vídeo, *etc*) organizadas e mantidas pela mesma organização, pelo mesmo grupo ou indivíduo. As páginas *Web* estão acessíveis via *Internet*, de forma livre ou com algumas limitações de acesso.

World Wide Web (WWW): A vasta colecção de informação digital disponível na *Internet* sob a forma de páginas *Web*. Também é conhecida como a “teia mundial alargada”, disponível a todos os utilizadores que disponham de um computador e de uma forma de o ligar à rede, podendo assim aceder ao vastíssimo manancial de informação disponível. WWW, W3 ou simplesmente *Web*, como também é designado, funciona, muitas vezes, como sinónimo de *Internet*.

XML (*Extended Markup Language*): Extensão da linguagem *HTML* que descreve a natureza do conteúdo de uma página (para além das potencialidades da linguagem *HTML*).



Anexos

Anexo I

Endereços de *sites* recomendados para ensino e aprendizagem de Química

<http://www.glenbrook.k12.il.us/gbssci/phys/Class/estatics/u811e.html> (22-12-2002)
Descrição das várias formas de electrização.

<http://bioinfo.mbb.yale.edu/mbb452a/simulation/outlinec.htm> (22-12-2002)
Informação variada sobre ligações intermoleculares.

<http://www.molecularium.net> (22-12-2002)
Simulações em Química-Física.

<http://www.mocho> (22-12-2002)
Portal de cultura científica.

<http://www.miamisci.org/ph/teacher.html> (22-12-2002)
Conjunto de actividades para desenvolver nas aulas.

<http://www.webelements.com/webelements/elements/text/Pm/key.html> (22-12-2002)
Tabela Periódica interactiva da Universidade de Sheffield.

<http://www-wilson.ucsd.edu/education/gchem/> (22-12-2002)
Animações em Química Geral.

<http://course1.winona.msus.edu/jfranz/movies/instrumentsimulations.htm> (22-12-2002)
Espectroscopia e cromatografia.

<http://www.chamotlabs.com/Molecules/IceI.html> (22-12-2002)
Animações relativas a estados físicos.

<http://www.chem.leeds.ac.uk/delights/texts/> (22-12-2002)
Actividades experimentais da Universidade de Leeds.

<http://library.thinkquest.org/3659/> (22-12-2002)
Química Geral.

<http://www.chem4kids.com/> (22-12-2002)
Estudo de Química, recomendado para níveis mais baixos (7º, 8º e 9º anos).

<http://cti.itc.virginia.edu/~cmg/Demo/titr.html> (22-12-2002)
Simulação de titulações de aminoácidos.

<http://www.hwscience.com/smarsden/mediaf.htm> (22-12-2002)
Química Geral.

<http://www.hwscience.com/smarsden/unit06/munit6.htm> (22-12-2002)
Estados condensados da matéria.

<http://antoine.frostburg.edu/chem/senese/101/compounds/library.shtml> (22-12-2002)
Química Geral.

<http://www.psigate.ac.uk/ROADS/subject-listing/chemistry/541.2.html> (22-12-2002)
Química Geral.

<http://ir.chem.cmu.edu/irproject/applets/stoich/Applet.asp> (22-12-2002)
Simulação de reacções com reagente limitante.

<http://javalab.uoregon.edu/dcaley/elements/Elements.html> (22-12-2002)

Tabela Periódica contendo espectros de emissão e de absorção.

<http://www.chm.davidson.edu/ChemistryApplets/equilibria/Volume.html> (22-12-2002)

Simulação do efeito da variação do volume em termos de alteração do estado de equilíbrio químico.

<http://www.chm.davidson.edu/ChemistryApplets/equilibria/Temperature.html> (22-12-2002)

Simulação do efeito da variação da temperatura em termos de alteração do estado de equilíbrio químico.

<http://www.chm.davidson.edu/ChemistryApplets/equilibria/LeChatelier.html> (22-12-2002)

Simulação do efeito da variação da concentração de reagente em termos de alteração do estado de equilíbrio químico.

<http://www.psrc.usm.edu/macrog/index.htm> (22-12-2002)

Informação variada sobre polímeros.

<http://education.jlab.org/elementcrossword/index.html> (22-12-2002)

Tabela Periódica da Universidade de Oregon com actividades lúdicas.

<http://www.chem.ox.ac.uk/vrchemistry/default.html> (22-12-2002)

Laboratório virtual da Universidade de Oxford.

<http://www.colorado.edu/physics/2000/cover.html> (22-12-2002)

Portal da Universidade do Arizona contendo simulações interactivas e explicações sobre constituição da matéria.

<http://www.iupac.org> (22-12-2002)

Portal da IUPAC.

<http://www.ex.ac.uk/cimt/dictunit/dictunit.htm> (22-12-2002)

Dicionário de unidades.

<http://www.chemed.chem.purdue.edu/demos/index.html> (22-10-2002)

Conjunto de experiências interessantes.

<http://www.liv.ac.uk/chemistry/links/links.html> (22-10-2002)

Conjunto de ligações para Química da responsabilidade da Universidade de Liverpool.

<http://www.chemsoc.org> (22-12-2002)

Informação muito diversificada de Química.

<http://www.chemweb.com> (22-12-2002)

Informação muito diversificada de Química.

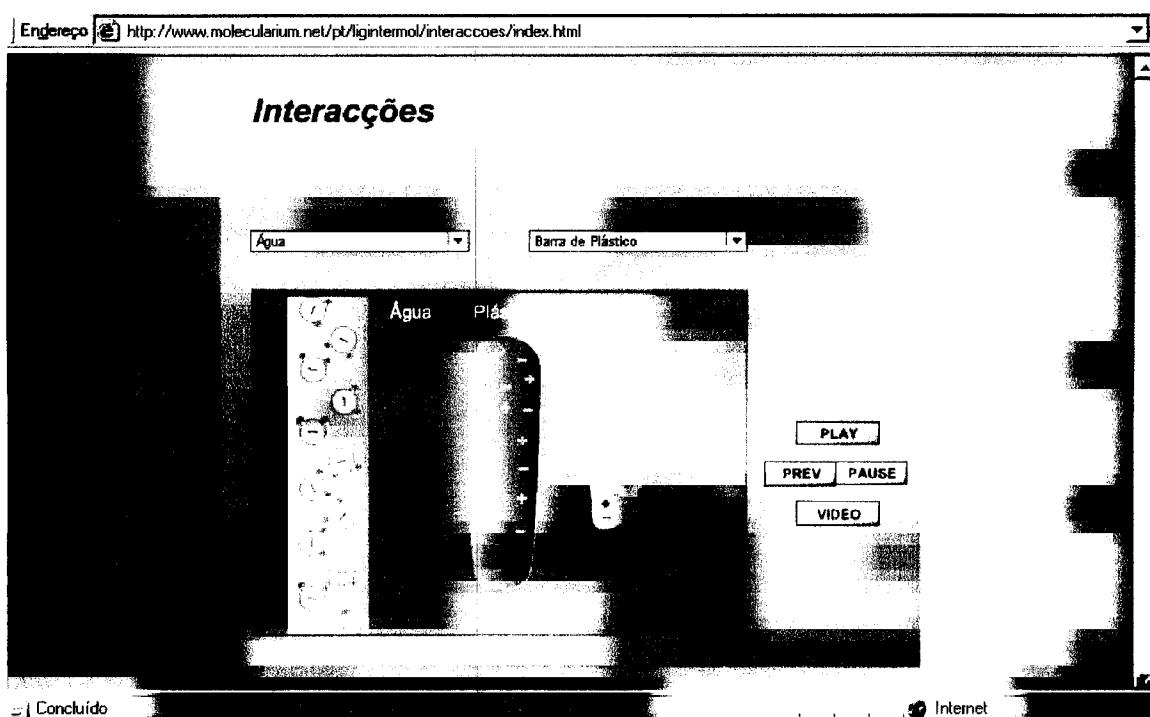
Anexo II

Roteiro de exploração (9º ano)

SIMULAÇÕES NA *INTERNET*

PARA O ENSINO DA QUÍMICA

9 º ANO



ROTEIRO DE EXPLORAÇÃO

1- Introdução

Os computadores estão presentes no nosso dia-a-dia, em muitas e variadas actividades humanas. Podem ser usados para passar texto, para construção de gráficos, para a realização de cálculos complicados e demorados, para diversão (filmes e jogos, por exemplo), para controlar máquinas na indústria, *etc.* Os computadores até podem ser utilizados como auxiliares no estudo: na exploração de *software* em CD-ROM e DVD sobre o corpo humano, programas sobre a constituição dos átomos, relativos ao sistema solar, aprendizagem do teorema de Pitágoras, na elaboração de trabalhos e relatórios... A lista é interminável.

Muito ligado ao desenvolvimento dos computadores está a *Internet*, um termo familiar a (quase) todos. A *Internet* é uma rede de computadores ligados entre si a nível mundial e que partilham informação. A informação está, assim, disponível em qualquer parte e a qualquer hora. Com a *Internet*, é possível obter informação a qualquer instante sobre os preços de computadores em Portugal, saber as novidades dos clubes de futebol, novidades do cinema, notícias do mundo, *etc.* É possível, igualmente, comunicar, por *email*, com pessoas que estão a muitos quilómetros de distância, quase instantaneamente.

A *Internet* é, ainda, uma fonte de informação e de material para o estudo. Para a Química, as simulações no computador são um material especialmente adequado, dado que muitos assuntos que são difíceis de representar ou de compreender podem ser mais bem explicados e aprendidos mais facilmente desta forma.

Nestas aulas vamos, navegando na *Internet*, explorar alguns vídeos (filmes pequenos) e simulações relativas aos mesmos. Para explorar o melhor possível a informação, vamos seguir um conjunto de passos que estão descritos, uma espécie de “guia”.

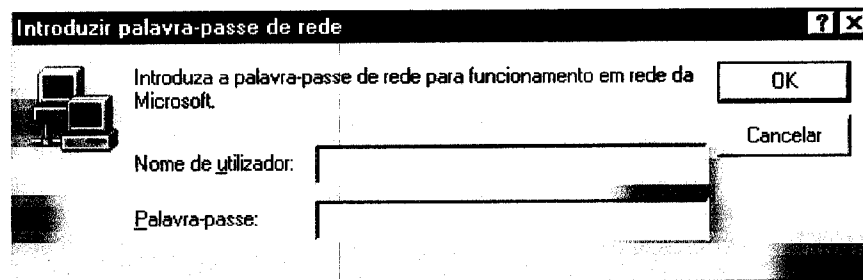
2- Ligação à Internet

Notas:

- 1- Em caso de dúvida em algum dos passos do roteiro, chamar o professor.
- 2- Se o computador estiver já ligado, começar no ponto 3.
- 3- É necessário ter o caderno e lápis / caneta para tirar informações, apontamentos com interesse e ainda para responder a algumas questões que irão sendo colocadas.

- 1- Ligar o computador (botão “POWER”).

Írá aparecer o seguinte quadro para preencher:



- 2- Com o rato, deslocar o cursor para cada um dos espaços em branco anteriores, introduzir o “Nome de utilizador” e o código / “palavra passe”. Carregar seguidamente em “OK” ou na tecla “enter” (↵).

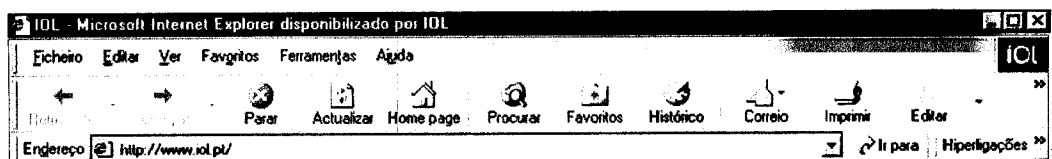
Ao fim de alguns segundos, aparece no monitor um conjunto de ícones.

- 3- Clicar, rapidamente, 2 vezes seguidas no ícone do *browser* “Internet Explorer” que aparece no monitor:



Caso exista outro *browser*, por exemplo o “Netscape”, pode igualmente ser utilizado.

Ao fim de alguns segundos... está-se na *Internet*! Deve aparecer no monitor uma imagem com a parte superior semelhante à seguinte:

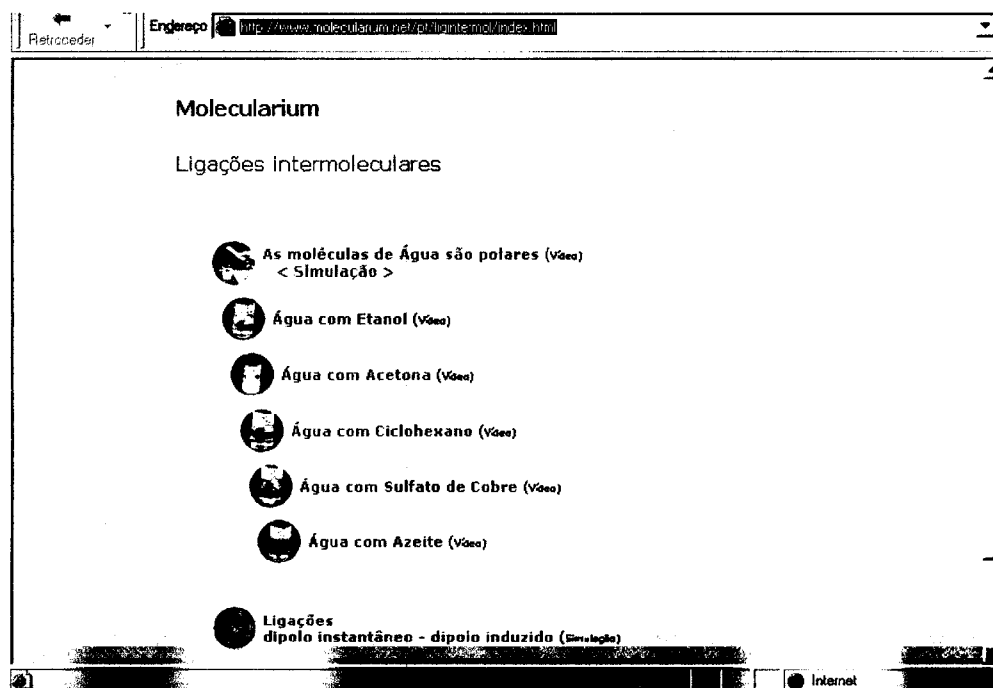


3- Exploração das simulações

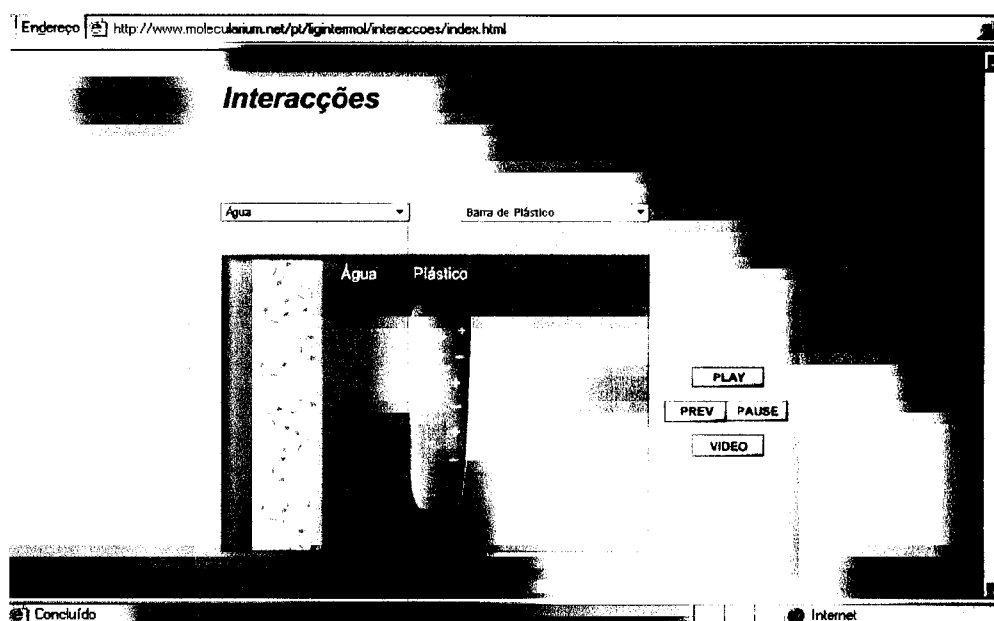
- 1- Escrever o endereço

<http://www.molecularium.net/pt/ligintermol/index.html>

- 2- Clicar, de seguida, na tecla “enter”(↵). Aparece no monitor a seguinte imagem:

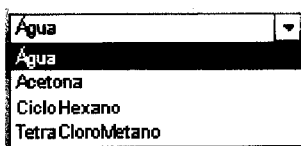


- 3- Arrastar o cursor até “Simulação” e clicar, aparecendo a seguinte imagem:



Informações importantes para continuar

Por cima da imagem principal e do lado esquerdo está um conjunto de nomes de substâncias diferentes dentro de um rectângulo. Pode-se ter acesso a eles clicando e fixando a seta que aparece no lado direito:



Do lado direito e por cima da imagem, dentro de outro rectângulo está um conjunto de materiais. O acesso a eles faz-se igualmente clicando e fixando a seta do lado direito:



Existem, ainda, quatro “comandos”:

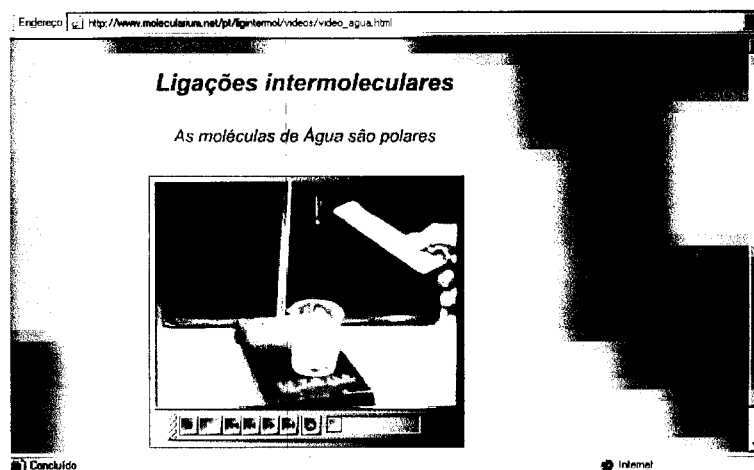
O comando “VIDEO” permite a visualização de uma experiência real filmada. A experiência corresponde ao conjunto que tiver sido escolhido dos dois rectângulos anteriores.

O comando “PLAY” permite pôr a simulação a correr.

O comando “PAUSE” permite parar a simulação cada vez que nele se clica. Para voltar a correr a simulação, basta clicar novamente em “PLAY”. O botão “PREV” permite andar com a simulação “para trás”, podendo ver-se imagens anteriores.

3.1. Água / Barra de plástico

- 1- Escolher o conjunto “Água” + “Barra de plástico”.
- 2- Clicar em “VIDEO” e aguardar alguns segundos. No monitor aparece a seguinte imagem:



- 3- Para ver o filme, clicar na seta cor de rosa que aparece na imagem: 

Observar com atenção.
- 4- Clicar no retângulo que contém uma cruz (X) para fechar: 
- 5- Observar a distribuição de cargas eléctricas no pano e na barra antes de ver a simulação. Há alguma diferença entre eles?
- 6- Se houver diferença, indicar.
- 7- Clicar em “PLAY” para começar a simulação.
- 8- Quando o pano começar a friccionar a barra de plástico, clicar em “PAUSE”. Utilizando este comando e o comando “PLAY”, observar com atenção:
 - A. As cargas eléctricas do pano ao friccionar a barra.
 - B. As cargas eléctricas da barra ao ser friccionada pelo pano.

Que movimento de cargas existe? Pode-se utilizar o comando “PREV” para reconhecer este movimento de cargas.
- 9- Quando o pano não estiver na imagem, clicar em “PAUSE”. Observar com atenção:
 - A. A distribuição de cargas na barra de plástico.
 - B. O fio de água e a distribuição das moléculas.
- 10- Clicar em “PLAY” para continuar. Observar com atenção o que ocorre à medida que a barra se aproxima do fio de água, nomeadamente:
 - A. O fio de água quando dele se aproxima a barra.
 - B. **A orientação das moléculas de água** à medida que se aproxima a barra. **Este pormenor será tanto mais bem entendido quanto mais devagar correr a simulação.** Para isso, deverá utilizar-se com frequência “PAUSE” e “PLAY” para visualizar, o melhor possível, a orientação das moléculas de água relativamente à barra.
- 11- Com a utilização sucessiva dos comandos “PAUSE” e “PLAY”, observar o que acontece:
 - A. Ao fio de água quando se retira (afasta) a barra.
 - B. À orientação das moléculas de água quando se retira a barra.

12- Concluir a simulação tendo o cuidado de a parar e correr consoante seja conveniente.

3.2. Água / Vara de vidro

- 1- Escolher o conjunto “Água” + “Vara de vidro”.
- 2- Clicar em “PLAY”.
- 3- Quando o pano começar a friccionar a vara, clicar em “PAUSE”. Ligando e desligando sucessivamente este comando, observar agora com atenção:

A. As cargas eléctricas do pano ao friccionar a vara.

B. As cargas eléctricas da vara ao ser friccionada pelo pano.

Que movimento de cargas existe?

- 4- Quando o pano não estiver na imagem, clicar em “PAUSE”. Observar com atenção:
 - A. A distribuição de cargas na vara de vidro.
 - B. O fio de água e a distribuição das moléculas.
- 5- Clicar em “PAUSE” para continuar. Observar com atenção o que ocorre à medida que a vara se aproxima do fio de água, nomeadamente:

A. O fio de água quando dele se aproxima a vara.

B. A orientação das moléculas de água à medida que se aproxima a vara. **Este pormenor será tanto melhor entendido quanto mais devagar correr a simulação.** Para isso, deverá utilizar-se com frequência “PAUSE” para se visualizar, o melhor possível, a orientação e “rotação” das moléculas de água.

- 6- Com a utilização sucessiva do comando “PAUSE”, observar o que acontece:

A. Ao fio de água quando se retira (afasta) a vara.

B. À orientação das moléculas de água quando se retira a vara.

- 7- Concluir a simulação tendo o cuidado de a parar e correr consoante seja conveniente.

3.3. Água / Barra de ferro

- 1- Escolher o conjunto “Água” + “Barra de ferro”.
- 2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

Algumas questões para responder antes de continuar...

Q₁- Por que é atraída a água pela barra de plástico eletrizada?

Q₂- E quando se aproxima a vara de vidro também eletrizada?

Q₃- Quando se aproxima da água uma barra de ferro friccionada não acontece nada. Porquê?

3.4. Acetona / Barra de plástico

1- Escolher o conjunto “Acetona” + “Barra de plástico”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.1.

3.5. Acetona / Vara de vidro

1- Escolher o conjunto “Acetona” + “Vara de vidro”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

3.6. Acetona / Barra de ferro

1- Escolher o conjunto “Acetona” + “Barra de ferro”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

Questões para responder antes de continuar...

Q₁- A acetona é uma substância polar ou apolar?

Q₂- Fundamentar a sua resposta anterior.

3.7. Ciclohexano / Barra de plástico

1- Escolher o conjunto “Ciclohexano” + “Barra de plástico”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.1.

3.8. Ciclohexano / Vara de vidro

1- Escolher o conjunto “Ciclohexano” + “Vara de vidro”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

3.9. Ciclohexano / Barra de ferro

1- Escolher o conjunto “Ciclohexano” + “Barra de ferro”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

Mais algumas questões para responder antes de continuar...

Q₁- Por que não é atraído o ciclohexano quer pela barra de plástico eletrizada quer pela vara de vidro também eletrizada?

Q₂- O ciclohexano é polar ou apolar?

3.10. Tetraclorometano / barra de plástico

1- Escolher o conjunto “Tetraclorometano” + “Barra de plástico”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.1.

3.11. Tetraclorometano / vara de vidro

1- Escolher o conjunto “Tetraclorometano” + “Vara de vidro”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

3.12. Tetraclorometano / barra de ferro

1- Escolher o conjunto “Tetraclorometano” + “Barra de ferro”.

2- Proceder da mesma forma que em 3.2.

Últimas questões...

Q₁- O tetraclorometano é uma molécula polar ou apolar?

Q₂- Justificar a resposta anterior.

4- Síntese

Organizar uma tabela / quadro que sintetize o que foi abordado nestas simulações.

Nome: _____ 9º ano Turma ____ Nº ____

Anexo III

Dados de natureza quantitativa (pré-teste)

Resultados dos testes (Tn) e médias ($\bar{x}$) no grupo controlo e no grupo experimental antes de ensino diferencial sobre polaridade molecular.

Grupo de controlo

Aluno	T1	T2	T3	T4	$\bar{x}$
1	20	54	43	36	38
2	7	31	44	17	25
3	19	40	45	42	37
4	80	76	90	86	83
5	12	56	20	27	29
6	10	18	23	21	18
7	25	29	51	57	41
8	35	39	33	70	44
9	12	14	6	12	11
10	28	32	14	24	25
11	23	42	63	77	51
12	23	48	24	25	30
13	5	8	17	20	13
14	21	28	26	12	22
15	14	18	12	22	17
16	14	14	15	17	15
17	16	36	45	50	37
18	0	21	15	18	18

Grupo experimental

Aluno	T1	T2	T3	T4	$\bar{x}$
1	18	29	41	26	29
2	17	48	26	27	30
3	45	41	44	33	41
4	30	76	60	86	63
5	19	12	25	26	21
6	14	28	31	17	23
7	2	24	15	13	14
8	8	9	6	28	13
9	18	23	26	26	23
10	10	33	33	17	23
11	32	33	16	41	31
12	19	36	25	19	25
13	27	44	16	70	39
14	6	31	33	17	22
15	34	51	34	72	48
16	9	45	21	27	26
17	11	21	40	33	26
18	26	36	25	51	35
19	26	61	28	40	39

Anexo IV

Teste sumativo (pós-teste)

Pós-teste (9º ano)

Escola Secundária de Alijó Ciências Físico-Químicas 9º ano	Ano lectivo 2 001 / 2 002
---	----------------------------------

Teste de avaliação

27 / 05 / 2 002

NOTA: Nos exercícios envolvendo cálculos, deverá apresentá-los.

1- Classifique como verdadeira (V) ou como falsa (F) cada uma das afirmações seguintes.

- A- O modelo atómico actualmente aceite é o modelo das órbitas electrónicas.
- B- Na massa dos átomos despreza-se a massa dos electrões.
- C- Um átomo de carbono (C) é três vezes mais pesado que um átomo de hélio (He).
- D- Uma molécula de etano (C₂H₆) é oito vezes mais pesada que um átomo de hidrogénio (H).
- E- A experiência de Rutherford permitiu concluir que o modelo “bolo de passas” para o átomo estava correcto.
- F- Numa solução aquosa de Al(OH)₃ de concentração 0,10 mol dm⁻³, a concentração do ião OH⁻ é 0,30 mol dm⁻³.

Massas atómicas relativas: $A_r(\text{H}) = 1,0$ $A_r(\text{He}) = 4,0$ $A_r(\text{C}) = 12$

2- Observe com atenção o quadro seguinte (as letras não são símbolos químicos).

Elemento	Número de massa (A)	Número atómico (Z)	Número de electrões	Número de neutrões	Número de protões
A	23				11
B		19		20	
C			13	14	

Complete o quadro.

3- Considere as representações seguintes de dois átomos:

⁴⁰₁₉ A⁴⁰₂₀ B

A e B são isótopos? Justifique.

- 4- Quando se fricciona uma régua de plástico com um pano de lã, esta fica electrizada, neste caso com excesso de electrões. Quando se aproxima a régua de um fio de água (sem tocar nele), este é atraído pela régua.

Entre as frases **A** a **D** seguintes, escolha a que melhor explique este fenómeno.

A água é atraída pela régua electrizada porque ...

A-... a água é um íman.

B-... a água é um dipolo eléctrico.

C-... a água possui ligações de hidrogénio.

D-... a água é apolar.

- 5- Se a mesma régua electrizada fosse aproximada de um fio de hexano (C_6H_{14}), sem tocar neste, o que esperaria que ocorresse (de **A** a **C**, escolha a opção correcta)?

A- C_6H_{14} ser atraído pela régua.

B- C_6H_{14} ser repelido pela régua.

C- Não acontecer nada (isto é, C_6H_{14} não ser nem atraído nem repelido).

- 6- Uma régua de plástico electrizada ao ser aproximada (sem tocar) num fio de acetona (C_3H_6O) atrai-o. A mesma régua, quando não está electrizada, ao ser aproximada do mesmo fio, não o atrai.

Entre as várias hipóteses (de **A** a **D**), escolha a que complete correctamente a seguinte afirmação.

Isto acontece porque ...

A-... a acetona é muito volátil.

B-... a acetona é uma molécula polar.

C-... a acetona é uma molécula apolar.

D-... a acetona possui hidrogénio na sua composição.

- 7- Se uma barra de vidro fosse friccionada com um pano de lã, ficaria com deficiência de electrões.

Quando se aproxima a barra de um fio de água, o que espera observar? Justifique a sua resposta. Inclua na resposta, se necessário, diagramas e/ou esquemas explicativos.

8- Preparou-se uma solução dissolvendo 17,1 g de sacarose ($C_{12}H_{22}O_{11}$) em água destilada, transferindo para um balão volumétrico de 500 cm^3 e completando com água até à marca.

8.1. Calcule, em mol dm^{-3} , a concentração da solução.

8.2. Qual a quantidade química (número de moles) de sacarose que existe em 100 cm^3 de solução?

$$M(C_{12}H_{22}O_{11}) = 342\text{ g mol}^{-1}$$

FIM

Bom trabalho

O professor

Anexo V

Resultados do teste sumativo (pós-teste)

Resultados (pós-teste) do grupo de controlo nas questões de polaridade molecular, destacados a “negrito” (*bold*).

Cotação	18	9	12	8	8	8	15	12	10	Total
Questão Aluno	1	2	3	4	5	6	7	8.1.	8.2.	100
1	18	9	6	0	8	8	0	2	0	51
2	9	9	3	0	8	8	0	0	0	37
3	18	9	3	0	8	8	0	0	0	46
4	15	9	12	8	8	0	12	12	10	86
5	15	9	3	8	0	8	3	0	0	46
6	12	0	3	8	8	0	3	0	0	34
7	18	9	9	0	8	8	0	2	0	54
8	12	8	3	8	8	8	0	12	5	64
9	0	1	3	0	8	0	6	0	0	18
10	12	1	3	8	8	0	0	0	0	32
11	18	9	0	0	0	8	6	2	10	53
12	6	0	0	0	0	0	0	0	0	6
13	12	3	2	8	0	0	0	0	0	25
14	6	2	3	8	8	0	0	0	0	27
15	9	0	0	0	8	0	0	0	0	17
16	9	6	0	8	8	0	0	0	0	31
17	12	7	0	0	8	0	3	2	0	32
18	18	5	3	0	0	0	0	0	0	26

Resultados (pós-teste) do grupo experimental nas questões de polaridade molecular, destacados a “negrito”(bold).

Cotação	18	9	12	8	8	8	15	12	10	Total
Questão Aluno	1	2	3	4	5	6	7	8.1.	8.2.	100
1	9	0	0	8	8	8	9	0	0	42
2	12	4	0	8	8	8	3	2	0	45
3	12	9	3	8	8	8	3	2	0	53
4	18	9	12	8	8	8	15	4	5	87
5	6	0	0	0	8	0	0	0	0	14
6	6	7	3	8	8	8	3	4	0	47
7	12	2	0	0	8	0	0	0	0	22
8	18	2	0	0	8	0	0	0	0	28
9	9	0	0	8	8	8	0	0	0	33
10	9	3	3	0	0	8	6	0	0	29
11	18	3	0	8	8	0	6	10	5	58
12	12	5	0	8	8	0	0	0	0	33
13	9	9	12	0	8	8	9	12	8	75
14	9	7	3	8	8	0	12	1	1	49
15	12	2	3	0	8	0	6	12	8	51
16	6	3	3	8	8	0	9	0	0	37
17	0	4	3	8	0	0	0	0	0	15
18	9	0	0	0	8	0	3	0	0	20
19	15	9	12	0	8	8	0	3	0	55

Anexo VI

Valores calculados para os ganhos de aprendizagem

Resultados dos ganhos de aprendizagem**Grupo de controlo**

Aluno	Pré-teste / %	Pós-teste	Pós-teste / %	Previsto (y)	GR	GRC
1	38	16	41	49	-8	36
2	25	16	41	41	0	44
3	37	16	41	48	-7	37
4	83	28	72	77	-5	39
5	29	19	49	43	6	50
6	18	19	49	36	13	57
7	41	16	41	51	-10	34
8	44	24	62	53	-9	35
9	11	14	36	32	4	48
10	25	16	41	41	0	44
11	51	14	36	57	21	65
12	30	0	0	44	-44	0
13	13	8	21	33	-12	32
14	22	16	41	39	-2	42
15	17	8	21	36	-15	29
16	15	16	41	34	7	51
17	37	11	28	48	-20	24
18	18	0	0	36	-36	8

Grupo experimental

Aluno	Pré-teste / %	Pós-teste	Pós-teste / %	Previsto (y)	GR	GRC
1	29	33	85	43	42	86
2	30	27	69	44	25	69
3	41	27	69	51	18	62
4	63	39	100	65	35	79
5	21	8	21	38	-17	27
6	23	27	69	39	30	77
7	14	8	21	34	-13	31
8	13	8	21	33	-12	32
9	23	24	62	39	23	67
10	23	14	36	39	-3	41
11	31	22	56	44	12	56
12	25	16	41	41	0	44
13	39	25	64	49	15	59
14	22	28	72	39	33	77
15	48	14	36	55	-19	25
16	26	25	64	41	23	67
17	26	8	21	41	-20	24
18	35	11	28	47	-19	25
19	39	16	41	49	-8	36

Anexo VII

Entrevista (12º ano) - parte I

Entrevista 12º ano - Parte I

Um dos tipos de ligações intermoleculares é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido.

- É capaz de descrever este tipo de ligação intermolecular?

Tendo em conta a resposta à questão anterior, pedir, por exemplo:

- Explique o significado de

1. dipolo instantâneo.
2. dipolo induzido.

- É capaz de descrever

1. a formação de dipolos instantâneos?
2. a formação de dipolos induzidos?

- Qual a importância da formação de dipolos? Por que se formam?

(Dar continuidade às perguntas atendendo às respostas dadas.)

- Como se faz a ligação intermolecular? O que permite que as moléculas se liguem entre si?

- Dúvidas ou algum pormenor nesta ligação que não esteja suficientemente compreendido?

De acordo com as respostas, explorar “pontos” que requeiram esclarecimento.

Anexo VIII

Entrevista (12º ano) - parte II

Entrevista 12º ano - Parte II

Um dos tipos de ligações intermoleculares é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido.

- É capaz de descrever este tipo de ligação intermolecular?

Tendo em conta a resposta à questão anterior, pedir, por exemplo:

- Explique o significado de

1. dipolo instantâneo.
2. dipolo induzido.

- É capaz de descrever

1. dipolo instantâneo.
2. dipolo induzido.

- Qual a importância da formação de dipolos? Por que se formam?

(Dar continuidade às perguntas atendendo às respostas dadas.)

- Como se faz a ligação intermolecular? O que permite que as moléculas se liguem entre si?

- Dúvidas ou algum pormenor nesta ligação que não esteja suficientemente compreendido?

De acordo com as respostas, explorar “pontos” que requeiram esclarecimento.

- Depois de ver a simulação “Dipolo”, que aspecto(s) destacaria como importante(s) para a compreensão da ligação intermolecular dipolo instantâneo / dipolo induzido?

- Relativamente às dúvidas que apontou anteriormente, há alguma que tenha ficado esclarecida?

(Em caso afirmativo) Qual ou quais?

Explique como.

- Que dúvida ou dúvidas continuam a persistir?

- Na sua opinião, como poderia ser melhorada a simulação?

(Dar continuidade às perguntas atendendo às respostas dadas.)

Anexo IX

Transcrição das entrevistas (12º ano)

Entrevista 1- Parte I

E- Como sabe, um dos tipos de ligação intermolecular que existem é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. Este tipo de ligação intermolecular é característica de que moléculas?

A- Moléculas apolares.

E- Por exemplo, a água serve?

A- Não.

E- Genericamente, é capaz de descrever este tipo de ligação?

A- Como hei-de dizer?...Há a criação de um dipolo instantâneo na molécula, vai haver uma maior concentração de iões numa parte da molécula... fica mais negativa...

E- Dipolo instantâneo? O que é isso?

A- É a diferença...Numa molécula, a diferença de cargas, mas num instante.

E- O que leva à formação desse dipolo instantâneo? O que faz com que ele apareça?

A- Sei lá... a atracção de outras moléculas pelos electrões.

E- Outras moléculas?

A- (silêncio)

E- Por que se forma esse dipolo? Acha que é necessário formar-se um dipolo?

A- Sim, para se fazer uma ligação entre as moléculas.

E- Qual a necessidade...

A- Diferença de cargas, não?...

E- Há alguma necessidade de se formar um dipolo, neste caso, neste tipo de moléculas?

A- Acho que sim.

E- Porquê?

A- (silêncio prolongado) Para ...para manter a estabilidade...

E- A ligação intermolecular é feita à custa de quê?

A- De electrões.

E- De electrões?

A- E diferenças de carga, sei lá...

E- A questão inicial era “Por que se formam os dipolos?” Tem ideia?

A- (não respondeu, silêncio prolongado)

E- Se não se formassem dipolos, haveria ligação?

A- Não. Acho que não.

E- Acha que não ou tem a certeza?

A- Tenho a certeza.

E- Então por que é que eles se formam?

A- Então, para formarem moléculas...

E- Mas já há moléculas... Já existem moléculas. O_2 , por exemplo, já é uma molécula...

A- (silêncio)

E- Por que se forma o dipolo?

A- (silêncio prolongado, não respondeu)

E- Sabe que se formam... É necessário que se formem?

A- (não respondeu).

E- É obrigatório que se formem?

A- Não.

E- Não?

A- Acho que não...

E- Se não se formassem dipolos instantâneos e dipolos induzidos, haveria ligação intermolecular?

A- Podia repetir?

E- Se não se formassem dipolos instantâneos e dipolos induzidos, haveria ligação intermolecular?

A- Não, não há, não há ligação. Pois... Estava a confundir com as ligações intramoleculares.

E- As ligações intermoleculares são entre moléculas. Se não houvesse a formação dos dipolos instantâneos e dipolos induzidos, haveria ligação intermolecular?

A- Não.

E- É possível?

A- Se não há a formação de dipolos, não vai haver a formação de ligação... Isso sei eu, mas não sei explicar muito bem porquê. Sei que há uma diferença das cargas, uma fica mais negativa, não é, e outra ...

E- Uma fica mais negativa! O que é isso?

A- O que nós demos nas aulas é que havia uma maior concentração dos electrões numa parte da molécula... tornava-se mais negativa, não é? Mais ou menos assim.

E- Concentração de electrões é capaz de não ser...

A- Falámos...

E- Provavelmente não foi concentração de electrões. É capaz de dizer o que quer dizer concretamente com essa expressão “concentração de electrões”?

A- Se calhar, estarem mais concentrados, mais juntos, não sei bem...

E- Concentração está relacionado com estarem mais concentrados...

A- Também tem a ver com a fórmula de estrutura da molécula...

E- Como assim?

A- (silêncio)

E- Uma molécula linear, por exemplo, e, por exemplo, uma molécula tetraédrica, exemplo CH_4 . São ambas apolares. Disse-me que isso tinha a ver, que a formação dos dipolos instantâneos – dipolos induzidos tem alguma coisa a ver com a geometria?

A- (silêncio)

E- Temos também moléculas de geometria triangular que também vão formar dipolos, não é?

A- (não respondeu, mas concordou)

E- Voltamos à questão “Por que é que se formam os dipolos?”

A- Para as moléculas se ligarem entre si...(risos)

E- E por que é que os dipolos permitem a ligação?

A- Vai haver partilha de electrões.

E- Partilha de electrões?

A- Não é assim que se formam as ligações?

E- Isso está relacionado com as ligações dentro de uma molécula, com partilha de electrões. Estamos a falar de ligações entre moléculas.

A- E entre moléculas como é que se faz?

E- Entre moléculas? Quem faz as perguntas sou eu...(risos). Só gostava de esclarecer o facto de que a ligação intermolecular não é ligação intramolecular.

A- Sim, eu sei...

E- As ligações intramoleculares são feitas à custa de partilha de electrões. A pergunta era “Em que medida os dipolos, neste caso, instantâneos-induzidos, permitem a ligação das moléculas?”

A- (não respondeu)

E- O que é que faz com que eles permitam a ligação? Ou por que é que eles permitem a ligação?

A- (silêncio prolongado, não respondeu)

E- Como é que se faz a ligação neste caso? Ligação intermolecular ... como é que se faz a ligação entre as moléculas?

A- Induz-se um dipolo...(risos)

E- Induz-se... como? Como é que o dipolo é induzido?

A- Talvez com a aproximação de moléculas, de outras moléculas...diferentes Por exemplo ... (não dá para perceber a conversa)

E- Imagine moléculas de O_2 . Como é que se forma o dipolo induzido?

A- Com a aproximação de outras moléculas.

E- De moléculas?

A- Sim. Ou de ele...não. De um átomo (risos). Acho que não. De moléculas... Por exemplo, naquele caso da água e da acetona... Não se cria um dipolo...

E- Ele já existe...

A- Na água, mas com a acetona e com o tetraclorometano, não forma...

E- Isso é sinal de que a água e a acetona são polares e o tetraclorometano é apolar...

A- Sim..

E- Havemos de voltar a isto mais tarde, mas para já há alguma dúvida que tenha relativamente a este tipo de ligação?

A- Sei lá... como é que se formam...

E- Mais alguma?

A- Hum...

E- Ainda não respondeu ao que permite a ligação entre as moléculas...

A- Se calhar, talvez não saiba, se calhar não é isto...

E- Obrigado pela colaboração...

Entrevista 1- parte II

E- A ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido é um dos tipos de ligações intermoleculares. Descreva, genericamente, este tipo de ligação.

A- Uma molécula apolar, num instante a sua nuvem electrónica tem dum lado um excesso de carga negativa que vai induzir outras moléculas que estão mais próximas a formar um dipolo instantâneo.

E- O dipolo induzido, como é que aparece?

A- Da outra molécula?

E- Temos um dipolo instantâneo e um dipolo induzido...

A- O induzido... O lado da molécula que está com excesso de cargas negativas vai atrair o lado da outra molécula que tem um défice de carga negativa.

E- Isso já é a ligação propriamente dita... A pergunta era como surge o dipolo induzido.

A- Há repulsão de electrões... ou atracção, depende do lado da molécula...

E- O que é um dipolo eléctrico?

A- Um dipolo eléctrico?! (silêncio) Um dipolo é quando a molécula não... Como hei-de explicar? É quando há mais electrões num lado da molécula do que noutro. É isso..

E- É capaz de explicar melhor...

A- Eu sei isso, mas explicar, não sei explicar... Um dipolo é quando a molécula não é homogénea na distribuição dos electrões... quando há mais um lado do que noutro...

E- Por que é que nestas moléculas se formam dipolos instantâneos e dipolos induzidos?

A- (silêncio) Por que formam?!

E- Há alguma necessidade de se formarem?

A- Depende... acho que não... quer dizer... acho que não...

E- Acha que não?

A- Se for para as moléculas se ligarem entre si é uma das razões...

E- Se não houvesse dipolos instantâneos – induzidos, as moléculas poderiam ligar-se entre si?

A- Se calhar são ligações fracas, as moléculas não ficam assim tanto tempo ligadas entre si....

E- Ligar-se-iam?

A- Sim...

E- Mesmo sem os dipolos?

A- Ah! Sem os dipolos, não, claro que não! São apolares, só se podem ligar com os dipolos...

E- Viu há bocado uma simulação em computador acerca deste tipo de ligação. Essa simulação contribuiu, de alguma maneira, para a percepção ou para a compreensão deste tipo de ligação?

A- Sim...

E- Como assim? O que gostaria de destacar em termos positivos?

A- A formação do dipolo...

E- Qual dipolo?

A- (silêncio) Como é que se induzia um dipolo numa molécula. Essa parte é que não tinha percebido.

E- Mais alguma coisa que gostasse de destacar....

A- Sobre a simulação? Acho que uma pessoa consegue compreender bem a formação dos dipolos...

E- E pela negativa?

A- (silêncio)

E- Alguma sugestão para a simulação?

A- Se calhar uma voz a descrever o que se passava... A explicar de uma forma simples mas a explicar bem...

E- Mais alguma coisa que queira acrescentar?

A- Sobre a simulação, acho que não, acho que percebi bem.

E- Obrigado pela colaboração.

Entrevista 2- Parte I

E- A ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido é um dos tipos de ligações intermoleculares. Caracterize genericamente este tipo de ligação.

A- É característico de moléculas apolares, em que existe a nuvem electrónica simétrica nas moléculas, mas, como os electrões estão em constante movimento, numa determinada altura vai existir assimetria de carga que vai gerar um dipolo instantâneo que vai induzir um dipolo noutra molécula.

E- O que é o dipolo instantâneo?

A- Dipolo instantâneo... Como não existe... Como se trata de moléculas apolares e como os electrões estão sempre em movimento, vai existir, numa determinada altura, maior concentração de electrões num determinado lado, ou seja, vai existir uma carga mais (electro)negativa num lado da molécula do que no outro e, por isso, vai gerar um dipolo instantâneo.

E- E o que é o dipolo induzido?

A- O dipolo induzido... vai ser induzido pelo dipolo instantâneo. Como tem uma carga (electro)negativa, vai induzir uma outra molécula que tem um lado menos (electro)negativo também...normalmente.

E- Como é que se induz o dipolo?

A- Como é que se induz?...

E- Como é que o dipolo é induzido? Ou como é que se gera, como é que se forma o dipolo dito induzido?

A- (...) Devido à simetria de carga que se vai gerar num determinado instante numa molécula. Na outra molécula, também como os electrões estão em constante movimento, também vai existir uma concentração dum lado mais negativo e noutro mais positivo, vai-se conseguir que se ligue à outra molécula, normalmente...

E- Que relação há entre o dipolo instantâneo e o dipolo induzido?

A- O dipolo instantâneo é que vai induzir o dipolo induzido (risos).

E- Como?

A- Como?!

E- Como é que o dipolo instantâneo vai induzir o outro dipolo, que é o induzido?

A- (silêncio)

E- Como é que isso se consegue? Como é que isso se faz?

A- Devido às diferenças de cargas nos electrões....

E- Às diferenças de cargas nos electrões?

A- Diferenças de cargas porque... uma molécula não é uma estrutura rígida, é flexível, os electrões, como estão sempre em movimento, num determinado instante a concentração dos electrões vai ser mais negativa num lado e no outro, noutra molécula, vai ser menos negativa e, por isso, vai existir atracção entre as moléculas.

E- Que importância é que tem a formação dos dipolos instantâneos e dos dipolos induzidos neste tipo de moléculas?

A- É importante porque são moléculas apolares e, se não fosse este tipo de ligação, nunca poderia haver ligações intermoleculares, neste tipo de moléculas.

E- Ficamos por aqui. Obrigado

Entrevista 2- Parte II

E- Novamente, vamos fazer umas perguntas sobre a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. Descreva genericamente este tipo de ligação.

A- É característica de moléculas apolares. A nuvem electrónica é simétrica, apresenta simetria de carga, mas como os electrões estão sempre em movimento, numa determinada altura vai-se gerar assimetria de carga, o que vai provocar um dipolo instantâneo, que vai induzir um dipolo numa outra molécula, que é o dipolo induzido.

E- Por que se diz dipolo induzido?

A- Porque é induzido por uma outra molécula, que é o dipolo instantâneo.

E- Como é que esse dipolo é induzido? O que é que leva à sua indução, à sua formação, digamos?

A- A maior ou menor carga numa molécula, que vai atrair os electrões de uma outra molécula...

E- O que quer dizer com “maior ou menor carga?”

A- Os electrões estão sempre em movimento numa molécula. Num lado vai estar mais negativo do que do outro e, por isso, a concentração vai ser maior num lado do que no outro.

E- A concentração?

A- A concentração não é bem o termo, mas (...) a concentração de electrões....

E- E o que é que isso tem a ver com a formação doutros dipolos, os dipolos induzidos? O que é que essa maior “concentração” de electrões numa determinada zona tem a ver com a formação dos dipolos induzidos?

A- Se for um lado negativo, vai tornar mais positivo o lado do dipolo induzido; se for ao contrário, vai ser negativo.

E- Por que é que isso acontece?

A- Não sei...

E- Não tem ideia...

A- Eu acho que é por estar sempre em movimento e tem que acontecer isso, porque não é simétrico, não é exactamente igual, por isso... não sei se é essa a razão...

E- Acabou de ver uma simulação da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido em computador. Há algum aspecto, daquilo que viu, que gostaria de destacar em termos positivos? Depois podemos falar em termos negativos. Em termos positivos, ajudou na compreensão...

A- Primeiro, num primeiro momento, apresentou uma molécula apolar e depois a assimetria de cargas, o que levou à indução de novas moléculas, o que permitiu a ligação intermolecular; isso permite visualizar melhor e compreender melhor o processo.

E- Numa primeira entrevista que tivemos fiquei com a ideia de que não me respondeu a uma pergunta que era “Por que é que se formam, nestas moléculas, dipolos instantâneos e dipolos induzidos?”

A- Porque, como os electrões estão sempre em movimento, numa determinada altura (lá estou a voltar outra vez ao mesmo) a concentração vai ser maior num lado que no outro e, por isso, há um dipolo, forma-se um dipolo.

E- E que importância é que isso tem em termos da ligação intermolecular? Que importância é que isso tem para a ligação entre moléculas apolares?

A- Se não fosse assim, não existiria outra maneira de elas se ligarem...

E- Relativamente à simulação que acabou de ver, há algum aspecto ou aspectos que acha que poderiam ser melhorados?

A- Não, não há nada...

E- Ficamos por aqui. Obrigado.

Entrevista 3- Parte I

E- Um dos tipos de ligações intermoleculares é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido.

É capaz de descrever, em termos sucintos, este tipo de ligação?

A- Este tipo de ligação ocorre quando há a formação de um dipolo numa molécula, dipolo instantâneo, visto que há movimentos dos electrões e, num determinado momento, há uma maior carga negativa num determinado ponto da molécula. Depois, esse dipolo, que é instantâneo, induz noutra molécula também uma, outro, induz também ... ou seja, atrai mais outra molécula e ... forma a ligação.

E- Falou de dipolo instantâneo e de dipolo induzido. Como é que se forma o dipolo induzido?

É capaz de caracterizar esse processo?

A- Depois de haver o dipolo instantâneo, com a aproximação de duas moléculas, ou seja, daquela que já tem o dipolo instantâneo e outra, há uma maior atracção entre os electrões e a carga menos negativa da outra molécula, ou seja, mais positiva.

E- Está a dizer que vai haver atracção entre os electrões de uma molécula e os electrões da outra...

A- Não. A parte mais positiva da outra...

E- Como é que surge essa parte mais positiva?

A- Porque os electrões estão na outra parte, não sei...

E- Que importância é que tem a formação dos dipolos?

A- Há união de moléculas, para ter mais estabilidade?... (silêncio)

E- Este tipo de ligação ocorre em que tipo de moléculas?

A- Apolares.

E- Acha que é fundamental ou que é imprescindível que se formem dipolos?

A- Em determinadas reacções, se calhar é imprescindível que isto aconteça...

E- Determinadas reacções?

A- Não, enganei-me... não sei, se calhar é, não sei...

E- Se não se formassem os dipolos, como é que se faria a ligação entre as moléculas?

A- Se não se formassem os dipolos?! ... Então também há outros tipos de ligações intermoleculares!

E- Sim, há outros tipos de ligações intermoleculares.

A- Sim...

E- Por exemplo, diga lá um...

A- Por exemplo, dipolos permanentes, na água...

E- Mas a questão era “se não se formassem dipolos instantâneos e dipolos induzidos neste tipo de moléculas, que são apolares, como é que seria possível a ligação entre as moléculas?”

A- Não seria, acho que não... pelo menos entre as apolares acho que não...

E- Então... qual a importância da formação dos dipolos?

A- Dos dipolos? Poder haver ligação entre moléculas que não são polares, que são apolares.

E- E como é se que faz a ligação entre as moléculas?

A- Como se faz? Em que aspecto?

E- Como é que ela se estabelece? Como é que duas moléculas apolares se ligam entre si?

A- Como é que se ligam?... (silêncio) Por exemplo ... há duas moléculas, então, há uma maior proximidade entre as duas moléculas e, por isso, elas vão estabelecer uma ligação para ficar mais estáveis, não é?

E- A pergunta era “como é que as moléculas se ligam entre si?”. Se são apolares, como é que elas se vão ligar entre si?

A- Pelos di... pelo que disse há bocado dos electrões terem um movimento muito irregular e, então, há determinadas alturas em que estão num determinado local e, por isso, há diferenças de cargas na mesma molécula, num determinado instante.

E- E o que é que isso...

A- Permite que essas moléculas apolares se liguem a outras moléculas.

E- Polares ou apolares?

A- Apolares, sim.

E- E o que é que permite que elas se liguem?

A- Que elas se liguem?! Como?

E- Como é que duas moléculas apolares se ligam entre si?

A- Pelas ligações inter... mas em que aspecto?

E- Se não houvesse a formação dos dipolos, acha que as moléculas apolares se ligariam?

A- Não... quer dizer, ligar mesmo acho que não...

E- Porquê?

A- Porque ... as forças de repulsão seriam maiores que as forças de atracção entre as moléculas...

E- E que forças são essas forças de repulsão e forças de atracção?

A- As forças de repulsão são as que há entre os electrões de uma molécula e os electrões da outra; e de atracção (...) entre as zonas mais positivas e as mais negativas, entre sinais opostos.

E- E o que são esses sinais opostos?

A- Por exemplo, uma zona pode ter mais electrões, logo ter maior carga negativa (não é?) e outra zona ter menos electrões e ter uma carga mais positiva... ou menos negativa, por isso há uma diferença de cargas que faz com que eles se possam ligar.

E- Obrigado...

Entrevista 3- Parte II

E- Um dos tipos de ligação intermolecular é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. Quer descrever sucintamente este tipo de ligação?

A- Então... inicialmente, há a formação do dipolo instantâneo, que é característico de moléculas apolares, em que, num determinado instante, há excesso de carga, ou seja, os electrões distribuem-se de uma maneira mais concentrada num lado da molécula formando um dipolo, isto é, uma parte mais positiva e outra mais negativa. Ou seja, numa parte é mais negativa e noutra menos negativa, digamos assim, porque é dos electrões. Forma-se um dipolo instantâneo. Esse dipolo instantâneo vai fazer com que, com a aproximação de outras moléculas, induza outro dipolo, de sinal contrário, na(s) outra(s) molécula(s)... e depois dá-se a ligação intermolecular entre essas moléculas, entre a parte mais positiva, digo mais negativa duma e a menos negativa da outra.

E- O que é um dipolo eléctrico?

A- Um dipolo eléctrico?! É a diferença de cargas numa molécula, por exemplo.

E- Como é que o dipolo instantâneo vai levar à formação do dipolo induzido?

A- Por repulsão... por exemplo, a parte mais negativa do dipolo instantâneo vai provocar com que os electrões da outra molécula se afastem dessa área de contacto. Por isso é que depois se forma um dipolo induzido.

E- Por que é que nestas moléculas, que disse são apolares, se formam dipolos?

A- Porque há determinados instantes em que há maior concentração, há mais electrões dum lado do que do outro, porque eles estão em constante movimento, não têm, digamos assim, um sítio fixo para estar. Como estão em constante movimento (...), há determinadas alturas em que deve haver maior quantidade deles num determinado ponto.

E- Se nestas moléculas não houvesse a formação de dipolos, como é que seria feita a ligação?

A- Se não houvesse a formação de dipolos instantâneos e dipolos induzidos?

E- Sim.

A- Não sei... não se ligavam...(risos).

E- Então, o que é que permite que estas moléculas se liguem entre si?

A- O que permite, em que aspecto?

E- Se os dipolos não se formassem, como é que as moléculas se ligavam?

A- Não se ligavam.

E- Se os dipolos não se formassem as moléculas não se ligavam. Então, o que é que permite que as moléculas se liguem entre si?

A- A formação desses... quer dizer, dessas diferenças de carga nas moléculas.

E- Dipolos?

A- Sim.

E- Viu há uns minutos uma simulação em computador acerca deste tipo de ligação. Há alguma coisa que queira destacar nessa simulação, em termos positivos ou em termos úteis, relativamente à compreensão deste tipo de ligação?

A- Dá-nos uma melhor visualização daquilo que se passa porque é tudo em termos muito abstractos; assim, dá-nos uma coisa mais concreta para nós nos apoiarmos, para percebermos mais conforme elas se efectuem.

E- É capaz de...

A- Por exemplo, quando demonstra a formação do dipolo instantâneo, há movimento dos sinais que designam a parte mais positiva e a parte mais negativa para os lados duma molécula, para os lados extremos da molécula e isso dá melhor a sensação da formação do dipolo. E também outro aspecto. Quando no fim se dá mesmo a formação da ligação, as moléculas ficam mais juntas, ficam mais próximas umas das outras. Se calhar, é uma coisa que eu não tinha muita noção.

E- Relativamente a esta simulação, há algum aspecto que acha que pudesse ser melhorado?

A- Acho que não, acho que está bem. Dá-nos a conhecer, demonstra a formação do primeiro dipolo, depois o que provoca (...) nas outras moléculas esse dipolo e depois dá-nos a formação mesmo da ligação, dá-nos uma visualização disso.

E- Relativamente a este tipo de ligação, há ainda alguma dúvida que tenha?

A- Não.

E- Ou que gostasse de ver esclarecida?

A- Acho que não...

E- Obrigado pela sua colaboração...

Entrevista 4- parte I

E Um dos tipos de ligação intermolecular que existem é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. É capaz de descrever este tipo de ligação?

A- Então... numa molécula apolar, como os electrões estão sempre constantemente em movimento, forma-se momentaneamente um dipolo na molécula, que depois vai induzir outro dipolo noutra molécula, o dipolo induzido.

E- Por que é o primeiro dipolo se diz instantâneo?

A- Porque surge na molécula momentaneamente devido ao movimento dos electrões.

E- E por que é que o dipolo induzido se diz induzido?

A- Porque é induzido pela molécula onde ocorre o dipolo instantâneo.

E- É induzido pelo dipolo instantâneo, é isso?

A- Sim.

E- Como é que o dipolo instantâneo induz o dipolo induzido? É capaz de descrever isso?

A- Porque ocorrem interacções entre os electrões de uma molécula e os de outra, será?

E- Interacções entre electrões? Que interacções?

A- Existe tipo uma ligação covalente onde há partilha de electrões...

E- Voltemos à questão: Como é que o dipolo instantâneo induz o dito dipolo induzido? Faz ideia de como isto acontece?

A- Não, não sei.

E- Há bocado ouvi-lhe dizer que havia interacções entre electrões dos dipolos. Se houver interacção entre os electrões dos dipolos, que tipo de interacção é essa?

A- (silêncio)

E- Que tipo de interacção poderá ser?

A- Não sei bem...

E- Os electrões têm que carga?

A- Negativa.

E- Entre electrões haverá...

A- Há repulsão...

E- Será que a repulsão entre electrões entre dipolos poderá levar à formação do dipolo induzido a partir do dipolo instantâneo?

A- (silêncio; não responde)

E- Consegue relacionar isso de alguma maneira?

A- Há repulsão entre os electrões dos dipolos, não é...

E- Voltemos à questão inicial. O dipolo instantâneo surge momentaneamente e está rodeado de muitas outras moléculas. Como é que esse dipolo poderá afectar ou influenciar as moléculas que estão à volta dele?

A- Então, esse dipolo...(silêncio) O dipolo na molécula pode ser devido à electronegatividade?

E- Como assim?

A- Então, para haver a formação dum dipolo tem que haver excesso de carga negativa numa parte e deficiência noutra...

E- Como é que isso surge?

A- Como surge?! Como disse há bocado, pelo movimento dos electrões.

E- E esse dipolo como é que poderá influenciar as moléculas que estão à volta dele?

A- Ah, sim! Como por exemplo, quando houver deficiência de electrões numa parte não vai haver tanta repulsão com os electrões das moléculas mais vizinhas.

E- E a parte do dipolo que tem excesso de electrões, como é que poderá influenciar a molécula que está mais próxima?

A- Vai haver repulsão de electrões, não é?, porque há mais electrões, formando-se, sei lá, não sei bem, nessa molécula um dipolo.

E- Um dipolo de que tipo? Como se chama esse dipolo?

A- Induzido, não é? Porque a molécula vai induzir esse dipolo, é isso...

E- Por que é que se formam dipolos nestas moléculas?

A- Que moléculas? Apolares?

E- Sim...

A- Então, já disse. Devido ao movimento dos electrões, pode-se formar uma zona com excesso de electrões e outra com deficiência, momentaneamente.

E- Se não se formassem dipolos eléctricos, como é que as moléculas se ligavam?

A- Podia repetir a pergunta?

E- Se não se formassem dipolos instantâneos e induzidos, como é que estas moléculas se ligavam?

A- Se não se formassem os dipolos... Não estou a ver...

E- Há alguma dúvida particular ou pertinente relativamente a este tipo de ligação intermolecular que queira esclarecer?

A- A última pergunta que me fez agora não sei bem como é que ia responder.

E- Mais nada?

A- Acho que anteriormente tive, mas não me lembro muito bem...

E- Obrigado.

Entrevista 4- parte II

E- Novamente, caracterize genericamente a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido.

A- Então, a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. É entre moléculas apolares e, numa molécula apolar, forma-se momentaneamente um dipolo instantâneo devido ao movimento incessante dos electrões que provoca um excesso de carga negativa numa parte da molécula e uma deficiência noutra parte. Esse dipolo, o dipolo instantâneo, vai induzir noutra molécula outro dipolo, o dipolo induzido.

E- Como é que se faz essa indução ou como é que aparece esse dipolo induzido?

A- Para que ocorra a formação da ligação tem que haver os dipolos. Então, o dipolo instantâneo... Ocorre a polarização da molécula apolar, não é? Essa molécula faz com que... Não sei explicar muito bem esta parte... Entre as moléculas, para que não ocorra repulsões electrónicas, numa parte onde há por exemplo excesso de carga negativa, na molécula vizinha onde há interacção com o dipolo instantâneo, com a molécula polarizada, forma-se uma deficiência de carga negativa. A que está a interagir com a parte onde há excesso de carga negativa. Não sei explicar muito bem esta parte, mas pronto...

E- Por que é que se formam dipolos nestas moléculas?

A- Para que seja possível a formação das ligações intermoleculares.

E- E por que é que havendo dipolos é possível a formação da ligação?

A- Porque para que não ocorra as repulsões electrónicas que evitem a formação da ligação, ou seja, quando há formação dos dipolos induzidos, é aquilo que acabei de explicar. Quando a molécula está polarizada, as moléculas vizinhas, por exemplo, onde há excesso de carga negativa, na molécula vizinha que vai interagir com essa há uma deficiência de carga, ou seja, para que não ocorra as repulsões electrónicas... Acho que expliquei isto tudo mal...

E- Havendo dipolos, a ligação é possível?

E- Sim.

A- Porquê?

E- Por causa disso, porque isso permite que não haja as repulsões...

E- Está a dizer que entre os dipolos vai haver forças de atracção, é isso?

A- Eu acho que ocorre forças de atracção, como de repulsão, mas as de repulsão não são...

E- Não são quê?

A- Tão intensas. Para permitir a formação da ligação, não é?

E- Eu não posso responder... Acabou de ver uma simulação desta ligação em computador. Qual o aspecto que queira destacar como positivo?

A- Permite visualizar como é que o dipolo instantâneo induz noutra molécula o dipolo, o dipolo induzido, e assim visualiza-se melhor e acho que se percebe um pouco melhor como é que se forma os dipolos.

E- Aspectos negativos? Algum aspecto que queira referir?

A- Acho que se colocassem ali tipo uma pausa para ver quando ocorre a formação do dipolo induzido, o movimento dos electrões para uma parte...

E- Alguma dúvida ainda relativamente a este tipo de ligação?

A- Eu acho que sei o básico, mas há dúvidas que acho que persistem...

E- Como por exemplo?

A- Acho que a dúvida é ver o movimento de cargas quando se formam os dipolos induzidos. É por isso que acho que devia haver um “pause” para uma pessoa perceber melhor o movimento de cargas.

E- Mais alguma coisa?

A- Sei lá, acho que não...

E- Alguma sugestão?

A- Não.

E- Obrigado pela sua colaboração.

Entrevista 5- Parte I

E- Um dos tipos de ligação intermolecular que existe é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. É capaz de descrever, genericamente, este tipo de ligação intermolecular

A- Pois...Descrever... Portanto... Eu penso que essas ligações acontecem quando uma molécula fica temporariamente em desequilíbrio, por exemplo, fica num lado com mais i... electrões do que no outro, ficando, por isso, um lado positivo e outro negativo, que vai fazer, que vai provocar também que os electrões das outras moléculas se afastem do lado negativo dessa molécula e que as moléculas que estejam do outro lado se aproximem do lado positivo. Pronto, é mais ou menos isto...

E- Ora bem... Por que é que o dipolo instantâneo se diz instantâneo?

A- Porque é flutuante, ocorre num dado instante, é só num determinado instante que está assim...

E- E mantém-se ou pode eventualmente variar?

A- Pode variar... acho eu.

E- Acha ou tem a certeza?

A- Acho que sim.

E- E o dipolo induzido, por que se diz induzido?

A- Porque é provocado por outra molécula, pelo desequilíbrio doutra molécula.

E- Está a dizer que o dipolo induzido é provocado por outra molécula. É capaz de dizer como é provocado?

A- Devido às cargas... Por exemplo, se estiver próximo dum lado da outra molécula que esteja saturada de electrões, os electrões vão ser repelidos para o lado oposto, por isso é que é induzido.

E- E relativamente à outra parte da molécula, o dipolo instantâneo, em que não excesso mas deficiência de electrões, como que ela influencia moléculas que estão adjacentes ou próximas?

A- Que estão próximas? Portanto... Como há falta de electrões nessa parte, os electrões doutra molécula que esteja adjacente vão-se dirigir, vão ser atraídos para essa parte.

E- Este tipo de ligação intermolecular ocorre em qualquer tipo de molécula?

A- (não responde)

E- Ou está restrita a alguns tipos de moléculas?

A- Eu acho que depende da estabilidade... ou é da energia dos electrões... acho que sim, não sei.

E- Por exemplo, este tipo de ligação ocorre na água?

A- Acho que sim... tenho a sensação que sim... Não sei...

E- Não ocorre, só ocorre em moléculas apolares. Partindo então do princípio que estas ligações não ocorrem em moléculas polares, como por exemplo a água, mas apenas em moléculas apolares, é capaz de explicar por que é que se formam os dipolos instantâneos e os dipolos induzidos nestas moléculas?

A- Por que é que se formam? Então... Acho que o movimento dos electrões é um bocado aleatório, por isso é uma questão de acaso...

E- Se não se formassem dipolos, como é que estas moléculas, que são apolares, se poderiam ligar?

A- Como é que se poderiam ligar?! Só se ionizássemos as moléculas...

E- Mas assim deixávamos de ter moléculas e passávamos a ter iões... Voltemos à questão. Há alguma necessidade de se formarem dipolos?

A- Sim... Porque se não se formassem dipolos, não havia, como é que se diz, não havia estrutura no material... as moléculas, assim um bocadinho, andavam à roda...

E- Como é que elas se ligariam se não houvesse dipolos?

A- Como é que se ligariam?! Não faço ideia...

E- Há alguma dúvida neste tipo de ligação intermolecular que tenha e que gostasse de ver esclarecida?

A- Dúvidas em?

E- Neste tipo de ligação intermolecular, dipolo instantâneo – dipolo induzido.

A- Dúvidas devo ter muitas, eu é que não sei quais...

E- Para já ficamos por aqui...

Entrevista 5- Parte II

E- Novamente, falemos da ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. É capaz de voltar a descrever brevemente a ligação?

A- Uma molécula apolar momentaneamente polariza-se e provoca a formação de dipolos nas moléculas adjacentes e cria-se uma ligação.

E- Cria-se uma ligação. Essa ligação é feita entre quê, digamos assim?

A- Entre as moléculas.

E- As moléculas como estavam inicialmente ou...

A- Na situação de dipolos.

E- Dipolos. Que dipolos?

A- O instantâneo e o induzido.

E- Os dipolos induzidos, como é que surgem?

A- Os induzidos surgem provocados pelo dipolo instantâneo, que tem um desequilíbrio na posição dos iões, digo dos electrões, provoca o afastamento dos electrões noutra molécula que está do lado negativo da molécula e a aproximação dos electrões de outra molécula do lado positivo.

E- Viu há pouco uma simulação desta ligação. Em termos da simulação propriamente dita, há alguma coisa que ache que seja útil em termos da compreensão deste tipo de ligação?

A- Está explícito, compreende-se bem.

E- Mas há algum pormenor que queira destacar pela positiva?

A- Pela positiva... Pela positiva, tem as fases todas da formação da ligação, é bastante explícita.

E- E agora, pela negativa?

A- Pela negativa... Acho que as moléculas deviam ser representadas doutra maneira...

E- Como?

A- Sem ser assim uma bola...

E- Tridimensionalmente?

A- Não tanto tridimensionalmente, mas dando, mostrando que é uma molécula mesmo, que não é... que dá o aspecto de ser uma espécie de um átomo e depois uma pessoa olha para o lado, molécula apolar.

E- Mais alguma coisa?

A- Não, acho que não. Está simples.

E- Disse que é simples, mas acha que explica suficientemente a ligação?

A- Sim...

E- Pronto, mais nada. Obrigado.

Entrevista 6- Parte I

E- Um dos tipos de ligação intermolecular que existe é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. É capaz de descrever sucintamente este tipo de ligação?

A- É uma ligação que se forma... Depois de se formar um dipolo instantâneo, as moléculas à volta desse dipolo instantâneo, induzidas por esse ficam também com, formam-se pólos, digamos assim, nas moléculas e elas têm tendência a atrair-se e forma-se uma ligação.

E- Por que é que o dipolo instantâneo se diz instantâneo?

A- Ocorre num momento específico, ocorre naquele momento, mas uns milionésimos de segundo depois pode até já nem ser um dipolo, volta a ser uma molécula apolar.

E- E como é que ele se forma, o dipolo instantâneo?

A- Por simples acaso, por movimentação de electrões, que por acaso acumulam-se mais, mais numa região específica e então formam-se aí dois pólos, um positivo e um negativo, negativo do lado dos electrões, claro!

E- Por que é que o dipolo instantâneo, desculpe, induzido se diz induzido?

A- Diz-se induzido porque ele à partida não existe, existe porque se criou o instantâneo que, por atracção e por repulsão, as moléculas à volta dele vão criar também elas dipolos, então foram induzidas por aquela que é dipolo instantâneo.

E- Está a dizer “por atracção e por repulsão”. É capaz de concretizar o que quer dizer com isso?

A- Ora bem... Na molécula do dipolo instantâneo, num lado vamos ter os electrões (não é?), ou seja, vai ter uma acumulação de cargas negativas e do outro uma acumulação de carga positiva. As cargas negativas vão afastar de si electrões das moléculas próximas (não é?) e, contrariamente, do outro lado as cargas positivas vão fazer com que as cargas negativas de outras moléculas vão para esse lado, ou seja, há repulsão de um lado e atracção do outro, induzem-se novos dipolos.

E- Este tipo de ligação intermolecular ocorre em qualquer molécula?

A- Este tipo de... dipolo instantâneo - dipolo induzido?

E- Sim.

A- Não. Ocorre em moléculas apolares. Se a molécula à partida já for polar, não há um dipolo instantâneo, ele é constante.

E- É capaz de dizer por que é que se formam dipolos nestas moléculas?

A- Por que é que se formam?!

E- Dipolos instantâneos e induzidos.

A- Induzidos, pronto, aparecem por causa do instantâneo. O aparecimento do instantâneo, acho que, no meu ver, é praticamente aleatório, é uma questão do acaso, os electrões vão-se movendo, vão-se movendo e, num dado momento específico, acumulam-se mais numa região específica.

E- Se não se formassem dipolos nestas moléculas, como é que elas se poderiam ligar?

A- Bem, isso é uma situação complicada, sei lá... Ser electrões de uma molécula passarem a fazer parte da outra em simultâneo? Estilo electrões de valência, mas não me parece uma situação muito correcta.

E- Então, está a propor que poderia haver transferência de electrões...

A- Exacto.

E- ... de um molécula para outra?

A- Sim, é uma hipótese. Não estou a ver muito bem entre as moléculas apolares, mas...

E- A questão era: Se não se formassem dipolos, como é que estas moléculas se poderiam ligar?

A- Exacto...(não responde)

E- Tem alguma ideia?

A- Assim à partida, não...

E- Então, por que é que se formam dipolos nestas moléculas?

A- Por uma questão de acaso... As moléculas não devem começar a pensar “Ora bem, vamos-nos ligar, vamos fazer aqui um dipolo”, não é? A não ser que a interacção com as outras moléculas, quer dizer, no geral tudo isso, vários factores perfeitamente aleatórios possam provocar o dipolo. É uma hipótese...

E- Há alguma dúvida relativamente a este tipo de ligação?

A- Não, à partida não.

E- Pronto, obrigado.

Entrevista 6- Parte II

E- Novamente, é capaz de descrever a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido?

A- Num dado momento específico, cria-se na molécula um dipolo que é instantâneo, porque com o movimento dos electrões, eles acumulam-se numa dada região (não é?), por isso cria-se um dipolo e as moléculas à volta, por indução desse, vão, por atracção e repulsão, também elas criar dipolos.

E- Temos estado a falar de dipolos instantâneos e induzidos... O que é um dipolo eléctrico?

A- Dipolo eléctrico... Dipolo eléctrico é... Se separarmos a palavra, vamos à separação da palavra, “di” dois, são dois pólos, temos dois pólos. Dipolo eléctrico é a existência, digamos assim, de um pólo positivo e de um pólo negativo, neste caso numa molécula.

E- O pólo negativo e o pólo positivo...

A- Negativo por acumulação de electrões(não é?), positivo por falta destes.

E- Acabou de ver uma simulação em computador acerca desta ligação. Tem algum pormenor, algum aspecto que gostaria de destacar como positivo no sentido da compreensão do fenómeno?

A- Interessante nesta questão é a gente olha e ver realmente as cargas a movimentarem-se nos dipolos induzidos por indução do dipolo instantâneo. Isso é bastante interessante. Ora... coisas mais interessantes? Está tudo explicado, tem todo o texto...

E- Mais alguma coisa de positivo?

A- De positivo? Acho que ... Pronto, tem a animação que chama a atenção, uma animação chama sempre a atenção...

E- E relativamente a aspectos negativos ou que considere possam ser úteis para melhorar a simulação?

A- O único aspecto que encontro mais coiso é logo no início da simulação. Aparece uma molécula e dessa molécula aparecem três, quer dizer acho que deviam começar logo as três, um conjunto de moléculas que existem, numa deles formou-se um dipolo instantâneo e as outras seriam induzidos, que é para as pessoas também não começarem a pensar “Então, de onde é que vieram aquelas duas?”, “Vieram daquela?”. Pronto, é uma questão.

E- Mais alguma sugestão?

A- Assim à partida... Não. Está interessante...

E- Alguma dúvida ainda, relativamente a este tipo de ligação?

A- Não, acho que está, que deu para perceber.

E- Obrigado.

Entrevista 7- Parte I

E- Um dos tipos de ligação intermolecular é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido. É capaz de descrever a ligação?

A- Dipolo instantâneo - dipolo induzido... No dipolo instantâneo acontece que num átomo, por exemplo de hélio, (acontece que) num dos lados vai haver uma maior concentração de iões negativos, digo electrões, relativamente ao outro para estabelecer um dipolo instantâneo. Dipolo induzido...(silêncio)

E- Por que se dá o nome de dipolo instantâneo?

A- Porque passado algum tempo volta a retomar o mesmo estado de antes.

E- E o porquê da palavra induzido? Por que se fala de dipolo induzido?

A- Porque esse átomo vai induzir outro ... vizinho a lhe retirar electrões para ele.

E- A retirar? Será isso?

A- (Silêncio / risos)...

E- O que quer dizer induzido?

A- Vai induzir o outro átomo a passar electrões para o átomo que estava instantâneo.

E- Por que se formam os dipolos, que importância é que isso tem? Isto é, por que se forma um dipolo instantâneo, por que é que se forma um dipolo induzido?

A- (Não responde)

E- Tem alguma importância em termos de ligação intermolecular?

A- Sim...

E- Justifique...

A- As ligações intermoleculares são as ligações que se estabelecem entre átomos vizinhos...

E- As ligações intermoleculares não são entre moléculas?

A- Não; essas são as intramoleculares...

E- Dentro de uma molécula são intra...

A- Pois...

E- Estamos a falar de ligações entre moléculas, intermoleculares...

A- Sim...

E- A pergunta é “Por que se formam os dipolos?”

A- Devido à carga, devido à polaridade que os átomos possuem?...

E- Isso serve para quê?

A- Para se estudar a acção... (silêncio) como se processa...

E- O que permite que moléculas apolares se liguem? O que está por trás da ligação, digamos assim?

A- As cargas?

E- As cargas? Como assim?

A- As cargas negativas entre...não, as cargas opostas entre essas moléculas.

E- Mas se as moléculas são apolares, não têm carga. Ou têm?

A- Não (risos).

E- Então por que é que se formam os dipolos?

A- (silêncio prolongado) Não sei...

E- Há alguma dúvida pertinente relativamente a este tipo de ligação?

A- Algumas...

E- Diga lá...

A- O porquê se estabelece a ligação...

E- Mais...

A- (silêncio)

E- Mas já tinha a dúvida ou apareceu agora?

A- (risos) Apareceu agora...

Entrevista 8- Parte I

E- Um dos tipos de ligações intermoleculares é a ligação dipolo instantâneo - dipolo induzido.

É capaz de descrever sucintamente este tipo de ligação?

A- Um átomo tem electrões. Os electrões movem-se e, num momento, pode acontecer que exista mais electrões dum lado do que do outro. Então, vai atrair um átomo vizinho; por exemplo, a parte onde há menos electrões vai atrair os electrões de um átomo vizinho formando, assim, um dipolo induzido... acho que é assim.

E- O que é o dipolo instantâneo?

A- Dipolo instantâneo? Acho que é quando num átomo momentaneamente há maior número de electrões num lado do que no outro (...) É assim, não é? Num instante, os electrões ao moverem-se ficam mais dum lado do átomo do que noutro.

E- Disse que este tipo de ligação, quando pedi para a descrever, ocorria em átomos. E em moléculas, também ocorre?

A- Em moléculas? Não sei, acho que sim...

E- Em que tipo de moléculas?

A- (não responde)

E- Por exemplo, na água?

A- Acho que sim, na água. Se há moléculas de água... Não, porque já há um dipolo permanente...

E- Acha que ocorre na água...

A- Não, acho que não porque isto é dipolo instantâneo – dipolo induzido, ou seja, tem que ser entre um dipolo que se forma instantaneamente com um que se vai induzir, por isso acho que na água não, porque já é um dipolo permanente.

E- E por exemplo em CCl_4 , tetraclorometano, poderá acontecer?

A- É uma molécula apolar...

E- Este tipo de ligação poderá ocorrer? Dipolo instantâneo – dipolo induzido?

A- Dipolo instantâneo – dipolo induzido? Não sei, acho que sim. Não sei...

E- Se em 2 moléculas ou 3 ou 4, as que quiser de CCl_4 , se não se formarem dipolos instantâneos e induzidos como é que elas se poderão ligar?

A- Se não se formarem? (silêncio prolongado). Se não se formarem?! Mas têm que se formar. Então, elas são apolares, acho que tem que se formar um dipolo para elas...

E- Para quê?

A- Para elas se ligarem, as moléculas, porque se ela é apolar, vai ter que formar um dipolo para os electrões, a parte negativa da molécula, atrair a parte positiva da outra molécula de CCl_4 ; por isso, acho que tem que se formar um dipolo.

E- A ideia era: Como falou de átomos, se também ocorre em moléculas este tipo de ligação?

A- Acho que ocorre, pode ocorrer...

E- Acha, tem a certeza...

A- Ocorre.

E- Em que tipo de moléculas?

A- Nas monoatômicas...

E- Nas monoatômicas, que são os gases raros...

A- Em poliatômicas...

E- Em poliatômicas quaisquer?

A- Não. Naquelas onde não há um dipolo permanente.

E- Que tipo de moléculas são essas onde não há um dipolo permanente?

A- São aquelas em que a geometria molecular... sei lá...

E- Pode eventualmente, mas se calhar é mais fácil chegar lá doutra maneira...

A- (silêncio prolongado)

E- Em moléculas polares este tipo de ligação ocorre?

A- Polares? Não.

E- E em moléculas apolares?

A- Pode ocorrer.

E- Pode ocorrer ou ocorre?

A- Ocorre. Tem que ocorrer. Se são apolares, tem que se criar um dipolo instantâneo...

E- O que é um dipolo eléctrico?

A- Um dipolo eléctrico?! (silêncio) Dipolo eléctrico...

E- Falou inicialmente que uma molécula ou um átomo, por exemplo de um gás raro, vai formar um dipolo instantâneo, um dipolo eléctrico instantâneo. O que é um dipolo eléctrico?

A- Acho que é quando há, num átomo ou numa molécula, maior número de electrões dum lado do que do outro. Assim, há dois pólos, há um pólo positivo e um pólo negativo, um pólo eléctrico positivo e um pólo eléctrico negativo.

E- Relativamente a esta ligação, há alguma dúvida pertinente? Esta ligação que é dipolo instantâneo - dipolo induzido. Há alguma dúvida que tenha?

A- É só uma ligação instantânea, no momento, não é? Ou pode durar? Como é instantâneo, não sei...

E- Não sei se é nisso que tem dúvidas. Por que é que se dá o nome de dipolo instantâneo? É isso, é essa a dúvida?

A- Sim... Cria-se o dipolo instantâneo e o dipolo induzido. Mas essas ligações são, quer dizer, não são...

E- Duradouras?

A- Sim...

E- Por que se dá o nome de dipolo instantâneo?

A- Porque como os electrões se estão a mover, num momento vai haver maior concentração, maior número de electrões num lado do átomo, acho. É num instante, ocorre num instante.

E- O que é que isso significa? Noutro instante, aquele dipolo instantâneo poderá estar assim ou não?

A- Não; pode mudar, ter outra orientação.

E- E por que se fala de dipolo induzido?

A- Induzido? Porque quando está criado o dipolo instantâneo, vai atrair os electrões do outro átomo, ou seja, vai *induzir* (muda o tom de voz) um dipolo, criando um dipolo induzido.

E- Atrair?

A- Os electrões.

E- Os electrões vão atrair outros electrões?

A- Não. A parte positiva do dipolo instantâneo vai atrair os electrões do átomo vizinho.

E- E a parte negativa do dipolo instantâneo?

A- A parte negativa...(silêncio prolongado)

E- Que relação há, digamos, entre a parte negativa do dipolo instantâneo e outra molécula ou outro átomo próximo?

A- Vai atrair a parte...não...

E- Electrões atraem electrões?

A- Não.

E- Então?

A- Sei lá, acho que os electrões não devem estar distribuídos uniformemente pelo átomo e, num momento, os electrões da parte onde há maior número de electrões no dipolo instantâneo vai atrair a parte menos negativa doutro dipolo... É um bocado confuso...

E- É um bocado confuso...

A- Por acaso, essa era uma dúvida.

E- Os electrões que estão acumulados numa dada zona do dipolo instantâneo, que relação é que eles têm ou o que é que eles fazem aos electrões que estão mais próximos numa molécula vizinha, digamos assim?

A- (silêncio)

E- Vão atraí-los, vão repeli-los, não fazem nada, fica tudo na mesma...

A- Vai ... repelir... vai repelir, não é? Mas se... vai repelir os electrões, vai ficar com menor número de electrões e assim não vai aproximar?...

E- Vai ficar com menor número de electrões, como? Quem é que vai ficar com menor número de electrões?

A- Nessa parte, repele o átomo ou repele os electrões?

E- Não lhe posso responder.

A- Digamos que é uma dúvida pertinente.

E- Por agora ficamos por aqui. Obrigado.

Endereços de simulações sobre ligações intermoleculares

<http://www.umr.edu/~gbert/INTERACT/intermolecular.HTM#iondipole> (22-12-2002)

Simulações em ligações intermoleculares (excepto ligação de hidrogénio), além de ligação iónica. Contém explicações para cada tipo de ligação.

<http://www2.gasou.edu/chemdept/general/molecule/forces.htm> (22-12-2002)

Simulações relativas a ligações intermoleculares (forças de dispersão, ligações dipolo - dipolo e ligações de hidrogénio). Contém “tutoriais” sobre cada tipo de ligação.

<http://nautilus.fis.uc.pt/rv/> (22-12-2002)

Simulações em realidade virtual sobre a molécula de água.

http://cwis.nyu.edu/pages/mathmol/modules/water/water_concepts.html (22-12-2002)

Simulações com cristais de gelo.

<http://www.che.utoledo.edu/meb/applet/Phasechange/Phasediagram1.html> (22-12-2002)

Simulações interactivas sobre mudanças de fase.

<http://www.chem.purdue.edu/gchelp/liquids/imf.html> (22-12-2002)

Animações muito simples sobre estados físicos.

http://www.dit.ie/sci/chemistry/competition01/chemweb5/w_pol.html (22-12-2002)

Simulação muito simples explicativa de ligações polares.

<http://invsee.asu.edu/nmodules/liquidmod/forces.html#8> (22-12-2002)

Simulações interactivas sobre ligações intermoleculares, contendo explicações.

<http://www.chm.davidson.edu/ronutt/chel15/Phase/Phase.htm> (22-12-2002)

Simulação interactiva de equilíbrio líquido - vapor.

