

## INTERPRETAÇÕES CONCEITUAIS DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO NOS REFERENCIAIS BIBLIOGRÁFICOS DE QUÍMICA INORGÂNICA NO ENSINO SUPERIOR

Luís Henrique Raimundo<sup>1</sup>; Isabela Paula da Silva<sup>2</sup>; Jane Maria Gonçalves Laranjeira<sup>3</sup>

*Universidade Federal de Pernambuco – UFPE – Centro Acadêmico do Agreste – CAA –  
luizhenrique2@hotmail.com<sup>1</sup>*

*Universidade Federal de Pernambuco – UFPE – Centro Acadêmico do Agreste – CAA –  
Isabelapaula.silva@outlook.com<sup>2</sup>*

*Universidade Federal de Pernambuco – UFPE – Centro Acadêmico do Agreste – CAA –  
jmg.laranjeira069@gmail.com<sup>3</sup>*

### Introdução

No meio acadêmico os modelos conceituais vão sendo fundamentados, dia após dia, com a contribuição de diversos autores, que se identificam com determinado assunto e os discutem de forma bem personalizadas nos livros textos referenciados da ciência Química, observando-se diferentes visões nestes referenciais bibliográficos para um mesmo modelo conceitual e cuja análise comparativa se caracteriza como um recurso didático importante na formação docente inicial podendo favorecer a compreensão mais aprofundada dos discentes. Um exemplo destas diferentes interpretações conceituais encontradas nos referenciais bibliográficos da ciência Química são as abordagens conceituais apresentadas pelos autores dos livros textos de Química Inorgânica sobre a Ligação de Hidrogênio que podem contribuir para a maior dificuldade de compreensão dos discentes sobre este tipo de interação no Ensino Superior.

O objetivo desse estudo foi desenvolver uma maior compreensão sobre a ligação de hidrogênio a partir de uma análise e de uma reflexão crítica sobre as interpretações conceituais formuladas por diferentes referenciais teóricos da Química Inorgânica para este tipo de ligação buscando-se favorecer uma abordagem conceitual mais ampla e aprofundada sobre este conceito. A discussão será iniciada com a apresentação dos modelos conceituais da ligação de hidrogênio, formulados pelos autores dos livros selecionados além da comunicação mais recente da Comissão Internacional da Química Pura e Aplicada sobre o assunto, seguida de uma análise crítica destas interpretações tentando identificar as convergências e divergências conceituais e possíveis dificuldades que possam ser vivenciadas pelos discentes para a compreensão destas abordagens.

### Metodologia

Trata-se de uma pesquisa bibliográfica com uma análise qualitativa sobre as interpretações autorais apresentadas nos livros de Química Inorgânica para o Ensino Superior sobre a ligação de hidrogênio. O levantamento bibliográfico foi realizado pelos discentes de um curso de formação docente em Química de uma universidade pública no Agreste de Pernambuco. Os três referenciais bibliográficos escolhidos e fazem parte do acervo da biblioteca do referido Campus foram os livros “Química Inorgânica” (Shriver; Atkins, 2008) e “Química Inorgânica não tão Concisa” (Lee, 2000), ambos referenciados nas ementas dos componentes curriculares de Química Inorgânica no referido curso. O livro “Química Inorgânica” (Housecroft; Sharpe, 2012) está disponível no formato de e-book em pdf. Os dados que embasaram a discussão sobre as dificuldades no entendimento dos modelos conceituais da Ligação de hidrogênio visando atender ao objetivo proposto foram levantados

a partir dos registros dos posicionamentos dos discentes nos instrumentos avaliativos do referido componente curricular (listas de situações problemas, provas) e no Grupo de Discussão na rede social Facebook mediados pelo docente e com feedback formativo em tempo real. Inicialmente serão apresentadas as interpretações conceituais dos autores referenciados sobre a ligação de hidrogênio até a recomendação mais recente da IUPAC, seguida de uma análise crítica e comparativa destas interpretações buscando-se identificar as dificuldades, e possíveis fatores, na interpretação das mesmas pelos discentes. Assim contribuindo para um pensamento mais crítico dos discentes na sua formação docente inicial.

## Resultados e Discussões

Antes de definir a ligação de hidrogênio Shriver (2008, p. 269) faz algumas considerações sobre o ambiente químico que possibilita a formação deste tipo de ligação se referindo a presença simultânea de: (i) Átomos altamente eletronegativos, tais como nitrogênio (N), oxigênio (O) e flúor (F) e (ii) Pares isolados em compostos ricos em elétrons. Em seguida este autor discute a polaridade elevada da ligação covalente entre o hidrogênio (H) e um elemento bastante eletronegativo (E) e, portanto, com carga parcial positiva ( $\delta^-$  E-H $\delta^+$ ) que possibilita a sua interação com um par isolado de um composto rico em elétrons. Em seguida conclui que a *“ligação de hidrogênio consiste em um átomo de hidrogênio entre átomos de elementos não-metálicos mais eletronegativos”*.

Na interpretação descritiva deste autor pode-se identificar na estrutura química desta ligação: (i) um átomo (E) com eletronegatividade elevada ligada ao átomo de hidrogênio (H), implicando a existência de uma ligação polar (E-H) com densidade de carga positiva ( $\delta^+$ ) e negativa ( $\delta^-$ ) localizadas, respectivamente, nos átomos H e E. (ii) A interação deste H com carga parcial positiva com pares isolados de elétrons livres de um átomo eletronegativo de um composto, representada a seguir: E- H $\delta^+$ ---:E).

Uma análise da interpretação conceitual de Shriver afirmando *“tratar-se de um átomo de H entre átomos de elementos não metálicos e mais eletronegativos”* sem levar em conta as considerações anteriores desse autor sobre a maior eletronegatividade dos átomos não metálicos acarretando a polaridade da ligação covalente (E- H $\delta^+$ ) e com a carga parcial positiva centrada no átomo de H que interage com ou átomo eletronegativo rico em elétrons dificilmente irá favorecer uma compreensão aprofundada dos discentes sobre este tipo de interação. Esta dificuldade ficou evidenciada pela afirmação de um discente de que *“as condições atômicas (para a ligação de hidrogênio, comentário próprio) é ter um átomo de hidrogênio ligado eletrostaticamente a outro átomo”*. Nesta afirmação este discente não leva em consideração as especificidades do ambiente químico dos átomos ligados nesta estrutura de ligação nem os diferentes tipos de interação: tanto a ligação covalente polar (E-H) do átomo de hidrogênio como a interação eletrostática deste hidrogênio com caráter ácido com outro elemento, também eletronegativo, e com caráter doador de elétrons.

Para Lee (1999, p.130) a ligação de hidrogênio *“é considerada, simplificada, como sendo uma atração eletrostática fraca entre um par de elétrons livres de um átomo e um átomo de hidrogênio ligado covalentemente tendo uma carga parcial  $\delta^+$ ”*. Esse autor complementa a sua interpretação com as seguintes observações: (i) A ligação de hidrogênio é formada apenas com os átomos mais eletronegativos citando como sendo os mais importantes os mesmos citados por Shriver (N, O, F) além do cloro (Cl). (ii) Estas ligações são fracas, com valores típicos de energia da ordem de 10 kJ/mol, mas que podem variar na faixa de valores entre 4 e 45 kJ/mol além de destacar que estes valores são inferiores aqueles

correspondentes as energias de dissociação das ligações covalentes. (iii) São ligações de grande importância nos sistemas bioquímicos e químicos.

Na representação descritiva do modelo conceitual da ligação de hidrogênio deste autor, pode-se identificar: o átomo de H, ligado covalentemente a um elemento eletronegativo (X) e, portanto, com carga parcial positiva ( $\delta^+$ ), formando uma ligação de natureza eletrostática com o par de elétrons livres de um outro átomo Y, de acordo com representação:  $X-H^{\delta^+} \cdots :E$  que é similar a representação apresentada anteriormente neste estudo para o modelo de Shriver.

Uma análise dos discentes centrada apenas na interpretação conceitual de Lee (1999, p.130) para a ligação de hidrogênio permitiria aos mesmos identifica-la como sendo uma atração eletrostática fraca entre um par de elétrons livres pertencente de um átomo e um átomo de hidrogênio com carga parcial  $\delta^+$  decorrente da ligação covalente que o mesmo faz, principalmente, com os átomos mais eletronegativos relacionados pelo autor (N, O, F e Cl). Como será discutido a seguir estas são condições restritivas não mais consideradas no contexto atual do modelo científico proposto para esta ligação.

Uma análise comparativa dos discentes centrada apenas nas interpretações conceituais destes dois referenciais bibliográficos de forma superficial não é suficiente para a compreensão aprofundada deste modelo de ligação como pode ser observado pela interpretação de um discente posta no Grupo de Discussão na rede social Facebook afirmando que *“os dois autores (Shriver e Lee, nota de autoria própria) concordam que são ligações com elementos mais eletronegativos, porém Shriver acrescenta que os elementos tem que ser não metálicos e D. Lee que a ligação precisa ser covalente”*.

Housecroft; Sharpe (2012, p. 280) afirma que *“a ligação de hidrogênio é formada entre um átomo de hidrogênio (H) ligado a um átomo eletronegativo e um átomo eletronegativo que possui um par isolado de elétrons”*. Segundo este referencial bibliográfico a existência de ligações de hidrogênio intermoleculares fica evidenciada a partir de dados físicos e estruturais em estado sólido de muitos compostos salientando ainda que tais interações ocorrem entre um átomo de hidrogênio (H) ligado a um átomo eletronegativo (X) e um átomo eletronegativo que possui um par isolado de elétrons ( $X-H \cdots Y$ ), onde o átomo Y pode ou não ser o mesmo que X. Ainda segundo este referencial *“não é necessário que o átomo X seja altamente eletronegativo para que possa haver uma significativa interação de hidrogênio”* ressaltando que é bem reconhecida a importância de ligações de hidrogênio mais fracas, particularmente as interações do tipo  $C-H \cdots O$ , em estruturas em estado sólido de moléculas pequenas e sistemas biológicos. Desta forma considera que a ampla variedade destas interações não permite mais uma definição com tal caráter restritivo.

Housecroft; Sharpe (2013, p. 280) relacionam ainda, na sua discussão, várias categorias de ligações de hidrogênio com suas respectivas entalpias de dissociação, cujos valores variam entre 1kJ/mol a 163 kJ/mol. Uma análise destas categorias permite concluir que, em geral, ocorrem ligações de hidrogênio mais fortes e simétricas com caráter covalente entre átomos iguais. Segundo estes autores *“está bem reconhecido que o termo ligação de hidrogênio cobre uma ampla gama dessas interações e com uma variedade correspondente de forças de interação”* apresentando como exemplos típicos as seguintes ligações de hidrogênio com seus respectivos valores de entalpias de dissociação, que são indicativas da força dessas interações:  $C-H \cdots O$  no  $CH_4 \cdots OH_2$  (1-3 kJ/mol) e  $F-H \cdots F$ , no  $[HF]_2$  (163 kJ/mol) ressaltando que cada ligação  $H \cdots F$  é relativamente forte com a entalpia de dissociação sendo de magnitude semelhante à da ligação F-F no  $F_2$  (158 kJ/mol). Housecroft; Sharpe (2013, p.



282) também cita a ligação de hidrogênio como sendo uma interação deslocalizada de três centros e dois elétrons (3c-2e) com um átomo de hidrogênio ocupando uma posição em ponte.

Uma análise comparativa detalhada dos discentes centrada nas interpretações conceituais destes três referenciais bibliográficos permitiriam aos mesmos identificar divergências nas interpretações conceituais destes autores com relação à restrição feita por Shriver (2008, p. 269) e Lee (1999, p.130) de que o átomo de hidrogênio esteja ligado principalmente aos átomos mais eletronegativos (N, O, F; Cl), com Housecroft; Sharpe (2013, p. 280) citando as ligações de hidrogênio assimétricas S-H---S (5 kJ/mol); C-H---O no  $\text{HC}\equiv\text{CH} \text{---OH}_2$  (9 kJ/mol); C-H---O no  $\text{CH}_2\text{-OH}_2$  (1 a 3 kJ/mol) como pode ser visto na interpretação de um discente postada no Grupo de Discussão na rede social Facebook: “.... Pelo que entendi, as ligações de H são apenas com o F, O, N, por serem os elementos mais eletronegativos”. H. Além desta restrição, apesar da definição de D. Lee ser bastante coerente com o contexto químico da ligação de hidrogênio levando em consideração: o átomo de H com ligado covalentemente a outro átomo e carga parcial positiva, o par de elétrons livres do átomo ao qual o H irá se ligar, este autor afirma tratar-se de uma atração eletrostática fraca. Ao fazer essa generalização observa-se uma contradição no que diz respeito à faixa de valores ampla das energias de dissociação dessas ligações citadas por Housecroft; Sharpe (2013, p. 282) e que variam na faixa de 1 a 163 kJ/mol. Segundo este referencial “o uso de descritores qualitativos: forte, moderada, fraca é comum dependendo do contexto químico dessa ligação”.

Estes mesmos autores também fazem referência ao modelo conceitual proposto por Steiner apresentando-o como uma “definição moderna dessa ligação e independente do conceito de eletronegatividade” e segundo a qual: “*uma interação X-H...Y é chamada de ligação de hidrogênio se ela constitui uma ligação local e se X-H age como um doador de próton para Y*”. (STEINER 2002, apud HOUSECROFT; SHARPE, 2013, p.280).

Estes autores ainda apresentam a definição da Comissão Internacional da Química Pura e Aplicada (IUPAC) e que os mesmos definem como sendo “abrangente” e segundo a qual “*a ligação de hidrogênio é uma interação atrativa entre o hidrogênio de um grupo X-H e um átomo ou um grupo de átomos Y na(s) mesma(s) molécula(s) ou em molécula(s) diferente(s), onde há evidência de formação de ligação*” (ARUNAN 2007, apud HOUSECROFT; SHARPE, 2013, p.280).

Num relatório técnico mais recente da IUPAC (ARUNAN, 2011, p. 1629) a ligação de hidrogênio é definida como “*uma interação atrativa entre um átomo de hidrogênio numa molécula ou num fragmento molecular X – H no qual o elemento X é mais eletronegativo que o H, e um átomo (Y) ou um grupo de átomos na mesma molécula ou numa molécula diferente, em que há evidências de formação de ligação*”. Segundo esta comunicação a formação da ligação de hidrogênio pode ser evidenciada tanto do ponto de vista teórico quanto experimental ou de ambos e destacam alguns aspectos desta definição, tais como: Trata-se de interações sempre atrativas; o átomo X deve ser mais eletronegativo que o H; se refere as “evidências” da formação desta ligação; não coloca condição eletrônica para o átomo aceitador do Hidrogênio mas o fato de ser uma interação atrativa implica que este átomo seja rico em elétrons; não define o significado de “ligação” que é usada, neste contexto, com o mesmo significado tradicional da Química. Sendo assim também foram estabelecidos alguns critérios que evidenciam a formação desta ligação, tais como: (i) As forças envolvidas na formação da ligação de hidrogênio são de natureza eletrostática decorrentes da transferência de carga entre um átomo doador e um aceitador de próton resultando na formação de uma ligação com caráter parcialmente covalente entre estes átomos H e Y, além daquelas originadas por dispersão. (ii) Os átomos X e H estão ligados por meio de uma ligação covalente polar (H-X) cuja força de ligação aumenta com o aumento da eletronegatividade do

átomo X. (iii) O ângulo da ligação X-H---Y é usualmente igual a  $180^\circ$  ou próximo deste valor com a força de ligação de hidrogênio aumentando quando este valor se aproxima de  $180^\circ$  diminuindo a distância H---Y. Esta direcionalidade é a marca registrada da ligação de hidrogênio.

Com relação as forças atrativas Desiraju (2011, p. 56) apresenta uma análise crítica e detalhada sobre o estado atual da arte da ligação de hidrogênio afirmando que a ligação de hidrogênio não se trata de uma ligação covalente fraca, de uma interação de van der Waals muito forte e nem é, particularmente, um tipo forte de interação dipolo-dipolo. Considera que apesar destes critérios cobrirem uma ampla maioria destas ligações os mesmos não podem ser usados como indicadores rigorosos para este tipo de ligação pois não são exclusivos para esta interação. Segundo este autor tratar-se de uma interação complexa com quatro características químicas principais: (1) Eletrostática (ácido/base); (2) Polarização (duro/mole); (3) Van der Waals (dispersão/repulsão) e (4) Covalência (transferência de carga). Além disto, sua estrutura de ligação contém, no mínimo, quatro átomos: X, H, Y e Z (ou grupos de átomos que também possam constituir-se como um fragmento aceitador de próton). Sendo assim a entidade X-H---Y-Z é apropriadamente considerada a ligação de hidrogênio porque cada uma das partes que a compõe (X-H; H---Y e Y-Z) afetam as outras sendo afetada por elas. Portanto é enganoso pensar que a ligação de hidrogênio está restrita apenas a parte constituinte H---Y.

De acordo com este autor precisa-se ter cautela com relação as evidências de formação da ligação de hidrogênio que podem em que esta interpretação tenha caráter subjetivo. Relaciona que as forças de natureza eletrostática aquelas entre multipolos permanentes, forças induzidas entre multipolos permanente e induzido, e forças dispersivas de London. No entanto se a interação primária for de natureza dispersiva não irá caracterizar a ligação de hidrogênio, como nos casos: Ar---CH<sub>4</sub> ou CH<sub>4</sub>---CH<sub>4</sub>. Portanto sugere que se evite usar genericamente a denominação interação de van der Waals neste contexto de ligação. Com relação a eletronegatividade dos elementos que compõem esta estrutura complexa de ligação este autor ressalta que a mesma é dependente do ambiente químico e sugere que nenhum sistema no qual a eletronegatividade de X seja menor que a de H seja considerado ligação de H.

## Conclusão

Todo este levantamento analítico dos referenciais bibliográficos da Química Inorgânica realizados neste estudo pode ser facilmente introduzido no planejamento de ensino docente e resultar numa aprendizagem significativa sobre determinado modelo científico da Química. A análise pontual de qualquer um dos modelos isolados propostos nestes referenciais teóricos poderia resultar na compreensão bastante limitada sobre a ligação de hidrogênio, considerando ainda as datas das edições que compõem o acervo da biblioteca acadêmica. A estratégia adotada no processo de ensino e aprendizagem do referido componente curricular pode favorecer a aprendizagem significativa sobre a ligação de hidrogênio com os discentes aprendendo a aprender garantindo-se, assim, a compreensão e a facilitação de novas aprendizagens ao ter-se um suporte básico na estrutura cognitiva prévia construída pelo sujeito através de provocações e discordâncias ou conflitos cognitivos que representem desequilíbrios a partir dos quais, mediante atividades, o mesmo consiga reequilibrar-se, superando a discordância reconstruindo o conhecimento (PIAGET, 1997, apud PELIZZARI et al., 2002, p.40).

## Referência Bibliográfica

ARUNAN, E. Hydrogen bonding and other molecular interactions. *Current Science*, v.92, p. 17, **2007**.

ARUNAN, E et al. Defining the hydrogen bond: An account (IUPAC Technical Report). *Pure Appl. Chem.*, v. 83, n. 8, p. 1629, **2011**.

DESIRAJU, G. R. Bond by Any Other Name. *Angew. Chem. Int. Ed.*, v. 50, n. 1, p. 52-59, **2011**.

LEE, J.D. Química Inorgânica não tão concisa. 5. ed. São Paulo: Edgard Blücher Ltda. **2000**. 527 p.

HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. Química Inorgânica. 3. ed. Rio de Janeiro: Editora LTC, **2012**, 624 p.

PELIZZARI A, et al. Teoria da aprendizagem significativa segundo Ausubel. *Rev. PEC*, v.2, n.1, p.40, **2002**.

SHRIVER, D.F.; ATKINS, P.W. Química Inorgânica. 4. ed. Porto Alegre: Editora Bookman, **2008**, 847 p.

STEINER, T. The hydrogen bond in the solid state. *Angew. Chem. Int. Ed.*, v. 4, n.1, p. 48, **2002**.