

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA – UNESP
Instituto de Química - Câmpus de Araraquara

NATAN RIBEIRO

A CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NO ENSINO DE CIÊNCIAS:

Introdução do conceito e a necessidade do ensino do tema

Araraquara

2024



NATAN RIBEIRO

A CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NO ENSINO DE CIÊNCIAS:

Introdução do conceito e a necessidade do ensino do tema

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara, para obtenção do título de Licenciado(a) em química.

Orientador(a): Prof. Dr. Paulo Roberto Bueno

Coorientador(a): Prof. Dr. Amadeu Moura Bego

Araraquara

2024

R484c

Ribeiro, Natan

A capacitância eletroquímica no ensino de ciências : introdução do conceito e a necessidade do ensino do tema / Natan Ribeiro. -- Araraquara, 2024
44 f. : il.

Trabalho de conclusão de curso (Licenciatura - Química) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara

Orientador: Paulo Roberto Bueno

Coorientador: Amadeu Moura Bego

1. Química - Estudo e ensino. 2. Análise eletroquímica. 3. Eletroquímica. 4. Reatividade (Química). 5. Físico-química. I. Título.

NATAN RIBEIRO


A CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NO ENSINO DE CIÊNCIAS:

Introdução do conceito e a necessidade do ensino do tema


Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Estadual Paulista (UNESP)
Instituto de Química, Araraquara, para obtenção
do título de Licenciado em Química.

Data da defesa: 29/11/2024


Banca Examinadora:

Documento assinado digitalmente
 **PAULO ROBERTO BUENO**
Data: 05/12/2024 16:47:34-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Paulo Roberto Bueno

Documento assinado digitalmente
 **DENIS RICARDO MARTINS DE GODOI**
Data: 09/12/2024 15:50:02-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Denis Ricardo Martins de Godoi

Documento assinado digitalmente
 **MELANY ISABEL GARCIA NATALE**
Data: 06/12/2024 07:01:19-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Ma. Melany Isabel Garcia Natale

Dedico este trabalho a Deus, Razão da minha essência.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por me permitir tamanha graça de estar em uma graduação e por ter me fortalecido durante todo este tempo, a Ele, a honra, a glória e o poder para todo sempre!

Aos meus pais, Luciana e Gionato, que não mediram esforços para me auxiliar de todas as formas possíveis e além das que eram possíveis, por cada momento de dedicação, de auxílio, de tudo.

A minha namorada, Safira, pelo suporte, incentivo, companhia e auxílio em todos os momentos.

Ao meu professor e orientador, Dr. Paulo Bueno, por ter aberto as portas para iniciar na área da eletroquímica, pela paciência e ensinamento que muito tem me auxiliado.

Ao meu professor e coorientador, Dr. Amadeu Bego, pela prontidão no auxílio e nas diretrizes que me ajudaram no desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus queridos amigos, Cícero, Milena e Mirela, por todo tempo de convivência e pela boa amizade que foi construída.

“Estuda. Estuda com empenho.
Se tens de ser sal e luz, necessitas de ciência, de idoneidade.
Ou julgas que, por seres preguiçoso e comodista, hás de receber ciência infusa?”

(Escrivá, 1939, p. 53-54)¹

¹ **ESCRIVÁ, J.** Caminho. [S.l.]: Caritas in Veritate, [s.d.]. 53-54 p. **Formato eletrônico (2012).**
Publicação original: 1939.

RESUMO

O conceito clássico de capacitância é formulado como a razão entre carga separada espacialmente e o potencial elétrico aplicado ao sistema, e, tem sido amplamente utilizado em física e engenharia. Os mais recentes avanços neste conceito estão no conceito de capacitância eletroquímica, que apresenta contribuições eletrostática quântica, e que tem sido um conceito utilizado na construção de biossensores e supercapacitores eletroquímicos. No ensino de eletroquímica, verifica-se que as atuais abordagens são limitadas em conteúdo uma vez que o conceito de capacitância é introduzido desde um ponto de vista puramente eletrostático, onde é aplicado para descrever as propriedades de solventes, dipolo molecular e a estrutura de dupla camada, por exemplo, mas dissociado de uma perspectiva molecular onde pode ser complementar e adequadamente correlacionado com a estrutura eletrônica de átomos e moléculas (onde se verifica a contribuição quântica para o conceito de capacitância). A existência dessa limitação no ensino superior conduz a geração de ideias equivocadas e que afetam diretamente em como os estudantes aprendem conceitos científicos, devido a limitação no aprendizado de um conceito que deve ser ensinado de forma mais ampla. Assim, ensinar o conceito de capacitância eletroquímica é importante para superar essas concepções errôneas, tanto no conceito de capacitância mais abrangente – a capacitância eletroquímica – quanto sua aplicação para o entendimento e na mensuração de reatividade química e a velocidade de reações eletroquímicas. Assim, este trabalho, de natureza conceitual, tem por objetivo evidenciar a necessidade de ampliar o entendimento do conceito de capacitância eletroquímica e da teoria associada a ela e que leva ao conceito de taxa quântica, que permite entender os fenômenos químicos e biológicos que envolvem o transporte e a transferência de elétrons desde uma abordagem de eletrodinâmica quântica.

Palavras-chave: capacitância; capacitância eletroquímica; reações eletroquímicas, reatividade química, e concepções alternativas de conceitos físico-químicos.

ABSTRACT

The classical concept of capacitance is formulated as the ratio between spatially separated charge and the electric potential applied to the system and has been widely used in physics and engineering. The most recent advances in this concept are in the concept of electrochemical capacitance, which presents quantum electrostatic contributions, and which has been a concept used in the construction of biosensors and electrochemical supercapacitors. In the teaching of electrochemistry, it can be seen that current approaches are limited in content since the concept of capacitance is introduced from a purely electrostatic point of view, where it is applied to describe the properties of solvents, molecular dipole and the double layer structure, for example, but dissociated from a molecular perspective where it can be complementary and adequately correlated with the electronic structure of atoms and molecules (where the quantum contribution to the concept of capacitance is verified). The existence of this limitation in higher education leads to the generation of misconceptions that directly affect how students learn scientific concepts, due to the limitation in learning a concept that should be taught more broadly. Thus, teaching the concept of electrochemical capacitance is important to overcome these misconceptions, both in the broader concept of capacitance - electrochemical capacitance - and its application to understanding and measuring chemical reactivity and the rate of electrochemical reactions. The aim of this conceptual work is therefore to highlight the need to broaden our understanding of the concept of electrochemical capacitance and the theory associated with it, which leads to the concept of quantum rate, allowing us to understand the chemical and biological phenomena involving the transport and transfer of electrons from a quantum electrodynamics approach.

Keywords: capacitance; electrochemical capacitance; electrochemical reactions, chemical reactivity, and alternative conceptions of physical-chemical concepts.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1:** Ilustração do fenômeno de capacitância por meio de um capacitor cilíndrico (figura superior) e de placas paralelas (figura inferior). 21
- Figura 2:** ilustração de um íon positivo solvatado por cargas opostas das moléculas do solvente. 22
- Figura 3:** ilustrações do movimento de carga para um nível atômico (A) e para um nível molecular (B). 25
- Figura 4:** ilustração de um sistema eletroquímico com as respectivas contribuições de capacitância quântica e eletrostática. 32
- Figura 5:** Relação entre energia e o número de elétrons adicionados ou removidos em sistema atômico. 34
- Figura 6:** Voltametria cíclica aplicada em diferentes velocidades. 36
- Figura 7:** Espectroscopia de capacitância eletroquímica derivada de impedância aplicada no potencial formal e que permite a mensuração da capacitância quântica. 37

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|----------|----------------------------|
| δ | Fator geométrico |
| μ | Potencial químico |
| C_q | Capacitância quântica |
| C_e | Capacitância eletrostática |
| C_μ | Capacitância eletroquímica |
| G_0 | Condutância |
| T_n | Transmissão em n canais |
| G | Quantum de condutância |

SUMÁRIO

| | |
|--|-----------|
| 1 INTRODUÇÃO | 15 |
| 2 OBJETIVOS | 18 |
| 3 REFERENCIAL TEÓRICO | 19 |
| 3.1 INTRODUÇÃO AO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA | 19 |
| 3.2 O CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROSTÁTICA | 20 |
| 3.2 O CONCEITO DE CAPACITÂNCIA QUÍMICA | 24 |
| 3.3 O CONCEITO DE CONCEPÇÕES ALTERNATIVAS..... | 27 |
| 4 DESENVOLVIMENTO | 31 |
| 4.1 INTRODUÇÃO AO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA | 31 |
| 4.2 O USO DO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NA APRESENTAÇÃO CONCEITO DE REATIVIDADE | 33 |
| 4.2.1 Condições para correlacionar a capacitância eletroquímica e a reatividade | 36 |
| 4.3 O USO DO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NA FORMULAÇÃO DO CONCEITO DE CONSTANTE DE VELOCIDADE DE REAÇÃO | 38 |
| 4.4 O CONCEITO DE CONCEPÇÕES ALTERNATIVAS ASSOCIADO À CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA | 39 |
| 6 REFERÊNCIAS | 42 |

1 INTRODUÇÃO

A química como ciência no contexto moderno envolve uma relação com as teorias que provêm do desenvolvimento científico na área de física, isto é, com o passar do tempo, novas teorias físicas podem melhor responder as questões e necessidades da química como uma ciência aplicada, de modo que estas teorias passam vigorar como vigente e, portanto, como tema a ser ensinado em determinados níveis de ensino da química.

Neste sentido, Perkins (1985) considera que os principais avanços nos conceitos químicos residem em teorias e modelos relacionados que visam explicações fenomenológicas e que permitem o entendimento entre relações fundamentais e seu uso em previsões das teorias e modelos e, neste sentido, o autor traz em suas falas a declaração: “Não consigo pensar em um tópico mais útil para nos ajudar a entender o mundo em que vivemos do que o assunto da eletroquímica” (Perkins, 1985, p.1018, tradução livre²).

Ao explorar o ensino de eletroquímica, ou o ensino de físico-química no contexto do ensino superior, verifica-se que “se ensina muito pouco (se é que se ensina) fora das áreas clássicas da eletroquímica associadas a células reversíveis e às informações termodinâmicas que podem ser derivadas de seu estudo” (Conway; Salomon, 1967, p.554, tradução livre³).

Os mesmos autores ainda consideram que esta situação ocorre dada uma “apresentação inadequada e anacrônica da eletroquímica” no contexto dos materiais sugeridos aos estudantes de graduação, como livros didáticos atuais ou antigos, aulas e até mesmo práticas de laboratório (Conway; Salomon, 1967). Sendo este entendimento corroborado por outros autores (Birss; Truax, 1990; Chambers, 1983).

Ora, os mais recentes avanços da eletroquímica apontam para um conceito que compreende as contribuições das mecânicas clássica e quântica como um conjunto unívoco. Este, também, tem orientado as mais recentes produções em termos de

² I can think of no more useful topic to help us understand the world in which we live than the subject of electrochemistry.

³ usually rather little is taught (if at all) outside the classical areas of electrochemistry associated with reversible cells and the thermodynamic information that can be derived from their study.

desenvolvimento de novas tecnologias, já definido amplamente, este conceito recebe o nome de capacitância eletroquímica (Bueno, 2023; Binninger, 2023).

Este conceito tem sido explorado para as mais diversas aplicações, como a construção de supercapacitores que podem permitir melhor uso, conservação e transmissão de energia (Nguyen; Le; Tran, 2024; Bueno *et al*, 2021), biossensores que podem auxiliar no diagnóstico das mais variadas doenças (Lima *et al*, 2018; Avelino *et al*, 2021), entre outras aplicações da química ou de áreas correlatas.

Ora, tem-se que até o momento não há estudos que demonstrem a existência do conceito de capacitância eletroquímica em nível de graduação, entretanto, tem-se a hipótese, com base no cenário apresentado, de que este tema não é ensinado no contexto do ensino superior de forma geral (mesmo em nível de pós-graduação), de modo que o entendimento dos sistemas eletroquímicos permanece somente atrelado a uma visão incompleta que envolve apenas a visão eletrostática da capacitância, e neste sentido a visão quântica e eletroquímica (eletrostática e quântica em conjunto) não são apresentadas.

Neste contexto, não ensinar o grau mais elevado de entendimento do conceito de capacitância pode induzir aos alunos o entendimento de que os fenômenos eletroquímicos são regidos apenas por modelos clássicos, entre outras induções que estão relacionadas com a temática discutida neste texto.

Estas induções podem se configurar em formas de pensar que apresentam em sua estrutura estes erros induzidos intrínsecos e incompletos, de modo que, se cristalizam na criação de ideias que fornecem uma compreensão incorreta dos fenômenos eletroquímicos, portanto, limitando também o avanço da ciência química e sua sub-área de eletroquímica que, podem não só prejudicar à aprendizagem dos alunos por propagarem as induções iniciais que foram criadas devido a apresentação de um entendimento menos elevado do conceito, como também limitar o avanço da ciência.

Esta possibilidade de ensinar um termo de forma incompleta recebe na literatura o nome de concepções alternativas, e diz respeito à errônea compreensão de ideias, objetos e/ou eventos com base nas experiências pessoais dos alunos, por vezes adquiridos durante o próprio aprendizado incompleto de um conceito e podem dizer respeito às noções preconcebidas, às crenças não científicas, às teorias

ingênuas, às concepções mistas ou aos mal-entendidos conceituais bem como incompletos (Thompson, 2016).

Assim, uma vez entendida a existência desse sequenciamento (ideias errôneas que se tornam concepções alternativas que geram prejuízos educacionais) por meio da apresentação incompleta da natureza dos fenômenos eletroquímicos (concepções alternativas) e da que permitiria, se visto de forma completa, relacionar com teoria de primeiros princípios que apresenta um entendimento mais avançado da relação da capacitância quântica com velocidades de transferência e transporte eletrônico e que permite o entendimento de fenômenos cinéticos mais avançados, como é o caso da (teoria da taxa quântica – *quantum rate*, que nasce do conceito de capacitância eletroquímica e se estabelece como uma necessidade de ser ensinada por permiti alterar o padrão de ensino da eletroquímica visando a inserção dos conceitos da mecânica quântica aplicada no sentido de sanar o problemas antes não mensuráveis por falta de entendimento conceitual de termos e fenômenos.

2 OBJETIVOS

Este trabalho, de natureza conceitual, tem por objetivo geral evidenciar a necessidade do entendimento do conceito de capacitância eletroquímica e da teoria da taxa quântica que advém deste conceito como uma ferramenta conceitual e que permite a superação de limitações associadas aos conceitos puramente clássicos de capacitância eletrostática e que limita a compreensão mais completa da eletroquímica, tanto do ponto de vista termodinâmico como cinético e reacional.

Para melhor dispor este objetivo, divide-se em três objetivos específicos, sendo eles:

- Estabelecer relações entre os fundamentos da capacitância eletrostática e química como sendo um conceito comum de capacitância eletroquímica, onde evidencia-se a contribuição de duas naturezas de energia que contribuem para a dinâmica quântica do sistema;
- Estabelecer relações entre os fundamentos da capacitância eletroquímica e os conceitos de reatividade (em geral) e velocidade de reação eletroquímica (em específico);
- Evidenciar a necessidade do ensino da capacitância eletroquímica no âmbito do ensino superior para o entendimento da dinâmica quântica das reações eletroquímicas e da natureza quântica da constante de velocidade de reação e que também fundamentam as bases da eletrônica molecular.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

A presente seção está dividida em uma introdução ao conceito de capacitância, a apresentação da capacitância do ponto de vista eletrostático e do ponto de vista químico.

3.1 INTRODUÇÃO AO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA

A conceitualização do termo capacitância e da sua definição fenomenológica tem sua origem no século XVIII com Luigi Galvani e Alexandre Volta com o surgimento da pilha elétrica (Guedes, 2003), sua unidade de no sistema internacional de unidades é referida como Farad (F) em homenagem ao físico e químico Michael Faraday, que contribuiu amplamente para os campos da física e da química quase indistintamente, bem como o desenvolvimento de pilhas eletroquímicas.

Por exemplo, existe a lei da indutância de Faraday (como uma das equações da eletrodinâmica de Maxwell) e a lei da eletrólise de Faraday que define a constante de Faraday como a quantidade de moles ($6,02 \times 10^{23}$) de elétrons (Becker, 2001), sendo uma constante de fundamental importância na eletroquímica clássica.

O conceito de capacitância não é útil apenas em eletrônica, onde capacitores são usados como componentes de circuitos eletrônicos, mas também em dispositivos de armazenamento de energia, como baterias e supercapacitores, onde as reações químicas e a presença de íons são bastante importantes para o funcionamento dos componentes capacitivos, caso contrário, não poderão funcionar adequadamente para as aplicações exigidas atualmente (Bueno, 2019).

Para entender o ponto de vista químico da capacitância além da eletrostática tradicional, descreveremos como o conceito funciona em duas situações distintas, que serão chamadas, respectivamente, de eletrostática e química. Após esta descrição, apresentaremos o conceito de capacitância eletroquímica, suas aplicações e relações com os conceitos de reatividade e velocidade de reação, e como apenas pensar no conceito de capacitância somente do ponto de vista eletrostático é limitado.

3.2 O CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROSTÁTICA

Faraday formulou o conceito de capacitância, definida como C , sendo a razão entre uma quantidade inteira, definida dn , de carga elementar ($e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$) por unidade de diferença de potencial elétrico, definido como dV , levando a seguinte relação (Heerens, 1986):

$$C = \frac{dq}{dV} = e \frac{dn}{dV} \quad (1)$$

No qual o termo de carga $dq = e dn$ é a quantidade total de carga espacialmente separada pela aplicação de uma diferença de potencial elétrico dV entre dois pontos diferentes no espaço (Nalewajski, 1992). A quantidade de energia gasta neste processo de separação está associada apenas ao trabalho realizado pela fonte externa de potencial elétrico necessária para superar a interação atrativa coulômbica entre as cargas separadas.

Deste modo, nesta configuração de energia eletrostática (separação de carga por forças coulômbicas), a carga é obtida a partir das leis de Gauss como sendo proporcional ao de campo elétrico definido como ϕ_E , onde o fator de proporcionalidade é a constante dielétrica do ambiente que separa as duas cargas ε , levando-se a lei de Gauss definida como:

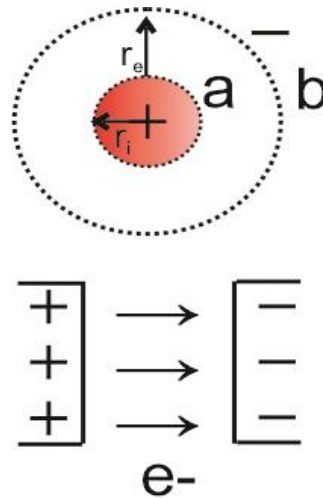
$$q = \varepsilon \phi_E \quad (2)$$

Ora, considerando a formulação de ϕ_E e a definição de $dV = -E dr$, onde dr corresponde a separação espacial na qual o trabalho da força coulombica é realizado, a geometria na qual as cargas são separadas é definida e a capacitância C sempre será resolvida em função de um parâmetro geométrico δ (com dimensão de comprimento) com ε sendo a constante de proporcionalidade entre C e δ tal que

$$C = \varepsilon \delta, \quad (3)$$

e devido a isto, a capacitância eletrostática também é denominada de capacitância geométrica. Uma forma de ilustrar esta relação é por meio do princípio de funcionamento de um capacitor cilíndrico, como apresentado na Figura 1.

Figura 1: Ilustração do fenômeno de capacitância por meio de um capacitor cilíndrico (figura superior) e de placas paralelas (figura inferior).



Fonte: elaborado pela Autor (2024).

A Figura 1 apresenta a ilustração do princípio de funcionamento de um capacitor cilíndrico (parte superior), no qual “a” representa o diâmetro do cilindro interno (r_i) com carga positiva e “b” o diâmetro externo (r_e) carregado externo negativamente carregado.

Por meio desta figura (parte inferior) nota-se que a carga positiva “sente” a presença da carga negativa por meio do campo elétrico (setas) e isso ilustra o caso particular de um capacitor de placas paralelas em que $\delta = A/d$ a capacitância é dada por

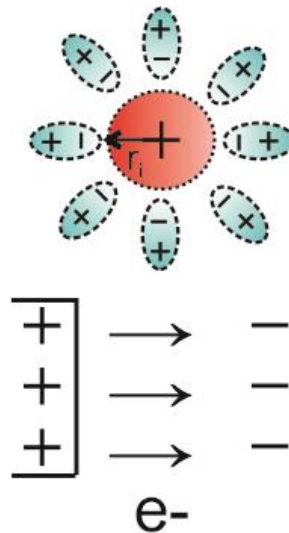
$$C = \varepsilon \frac{A}{d} \quad (4)$$

Na Eq. (4) o parâmetro d estará relacionado com a distância entre as placas do capacitor e representa a separação espacial de tal forma que

$$C \propto \frac{1}{d} \quad (5)$$

e a capacitância será sempre inversamente proporcional à distância de separação espacial das cargas. Para o caso do de separação a distâncias infinitas a lei de Gauss, permite definir a capacitância de cargas individuais, o que permite definir uma relação microscópica que permite descrever a capacitância de um íon isolado no espaço, e, portanto, obedecer às mesmas condições vistas para a Figura 1 em nível macroscópico, com o íon isolado ou em interação com as cargas de molécula de um solvente, como ilustrado na Figura 2.

Figura 2: ilustração de um íon positivo solvatado por cargas opostas das moléculas do solvente.



Fonte: elaborado pela Autor (2024).

Deste modo, observa-se uma relação de capacitância cuja carga positiva é proveniente do íon e a carga negativa é proveniente cargas pontuais negativas das moléculas de solvente que formam uma camada de carga de solvatação ao redor da carga positiva do íon e cuja capacitância obedece ao fator geométrico como apresentado na Eq. (3).

Os eletrólitos são soluções de solvente contendo sais dissolvidos e a separação de carga na interface entre a sonda e o solvente podem ter uma escala molecular que está frequentemente entre 0,3 e 0,8 nanômetros, implicando valores de capacitância consideravelmente altos devido ao fato de d ser muito baixo (neste caso correspondendo ao comprimento de Debye). Em outras palavras, os elevados valores de capacitância em interfaces eletroquímicas (envolvendo um metal em contato com

uma solução) se deve à estrutura de separação de cargas e que se denomina de dupla camada formada elétrica na qual o valor de δ é proporcional ao inverso do comprimento de Debye (Bueno, 2019). Para este contexto, o valor de d , diferente dos capacitores físicos de estado sólido, depende da concentração de sais, isto é, quanto maior a concentração de sais, menor o valor de d , e maior o valor da capacitância.

3.2 O CONCEITO DE CAPACITÂNCIA QUÍMICA

A separação de carga Coulombiana, como visto na seção anterior, se manifesta na escala atômica ou molecular, no qual as forças elétricas são predominantes sobre as gravitacionais, portanto, estas forças são importantes na química não apenas para descrever a interação entre íons e moléculas carregadas, mas também para definir as forças iônicas predominantes em alguns compostos químicos.

No entanto, existem contribuições capacitivas adicionais não relacionadas à geometria, que estão relacionadas com outros tipos de contribuições energéticas além da eletrostática, como as provenientes da estrutura eletrônica da matéria (átomos e moléculas). Para entender a origem deste tipo adicional de contribuição de capacitância no nível atômico e escala molecular, é importante entender o conceito de potencial químico μ , como apresentado por Pearson (1999).

O autor demonstra que em termodinâmica, μ é a razão entre a energia de Gibbs e o número de partículas trocado (reagindo) em um sistema de duas fases. O potencial químico pode também ser definido a partir de uma perspectiva da mecânica quântica, onde os elétrons são as partículas de interesse, não os íons ou átomos, como no caso da termodinâmica (Pearson, 1999).

Em outras palavras, a natureza da partícula é diferente, isto é, íons e átomos são partículas Boltzmannianas não degeneradas, enquanto os elétrons são partículas Fermiônicas degeneradas (Pearson, 1999). Portanto, o μ eletrônico definido a partir da perspectiva da mecânica quântica é a razão entre a energia E pelo número de partículas eletrônicas n (Nalewajski, 1992), tal que:

$$\mu = \frac{E}{n} \quad (6)$$

Note que a Eq. (6) aborda uma definição importante pois se correlaciona diretamente com a estrutura eletrônica, isto é, ao considerar que uma molécula tem energia E entre vários elétrons n , remover ou adicionar um elétron à molécula implica variações no potencial μ por partículas eletrônicas, que é um conceito quantificável que pode ser definido como dureza química e disposta na seguinte relação (Pinzón; Santos; Bueno, 2021; Pearson, 2005):

$$\frac{\delta\mu}{\delta n} = \frac{\delta^2 E}{\delta n^2} \quad (8)$$

Outro fator importante a ser considerado é o fato de que o potencial μ para átomos é quantificável como a média aritmética entre as energias de ionização (I) e energias (A) (Pearson, 2005; lafrate; Hess; Krieger; Macucci, 1995), ou seja:

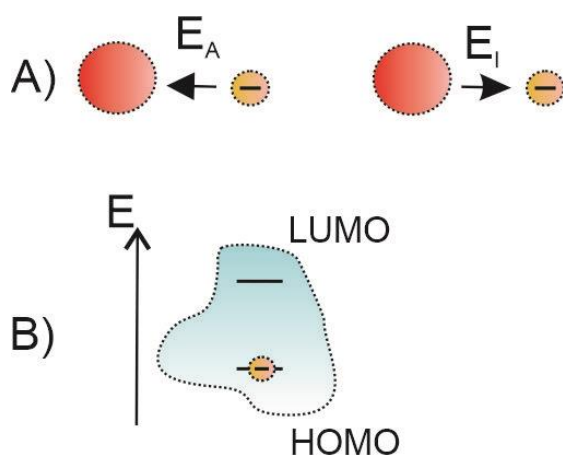
$$\mu = \frac{(I+A)}{2} \quad (9)$$

Por sua vez, para as moléculas, a relação se estabelece como a média aritmética entre o HOMO (orbital molecular mais ocupado) e o LUMO (orbital mais baixo desocupado) (Pearson, 2005), ou seja:

$$\mu = \frac{(E_H + E_L)}{2} \quad (10)$$

No qual E_H e E_L são a energia de os estados HOMO e LUMO, respectivamente. A variação de μ por partícula de elétron (ou seja, para n igualando-se à unidade) corresponde, para os átomos, à metade das diferenças entre as energias I e A , e para moléculas é quantificável como à metade das diferenças entre as energias E_H e E_L , assim, as relações entre as movimentações de carga neste contexto é apresentado na Figura 3.

Figura 3: ilustrações do movimento de carga para um nível atômico (A) e para um nível molecular (B).



Fonte: elaborado pela Autor (2024).

A Figura 3 apresenta a ilustração das energias relacionadas à capacitância eletroquímica, no qual o item a está relacionado a um sistema atômico considerando as energias de ionização (saída de um elétron do átomo) e afinidade (entrada de um elétron no átomo), e o item b está relacionado a um sistema molecular cuja mudança de energia se estabelece entre os níveis de energia de HOMO e LUMO. As cores utilizadas são meramente ilustrativas.

A partir deste aspecto do movimento de carga, há ainda um fator associado à diferença de energia, isto é, a consideração de que há uma relação entre a variação de potencial μ por meio de um quantificável intrínseco de relação $\Delta E = -eV$, ou relacionado como $\delta\mu = -e\delta V$ (Bueno; Davis, 2014).

$$\delta\mu = -e\delta V \quad (11)$$

Neste sentido, tem-se que uma variação do potencial químico da molécula por partícula eletrônica adicionada ou removida da molécula que corresponde também a uma variação da energia potencial elétrica interna do sistema. Com base na Eq. (11), pode-se retornar à definição de capacitância indicada na Eq. (1), que agora pode ser formulada em termos da contribuição das variações do μ eletrônico, de modo a se ter:

$$C_q = \frac{dq}{d\mu} = -e \left(\frac{dn}{d\mu} \right) = e^2 \left(\frac{dn}{dE} \right) \quad (12)$$

Em qual $dE = \delta\mu = -e\delta V$ usado na Eq. (12) corresponde implicitamente a uma diferença de energia associada com a variação de μ por partículas de elétrons, onde agora C_q é particularmente como capacitância química ou capacitância quântica.

Em uma ou outra terminologia, o significado de C_q implica que a energia associada à capacitância não é eletrostática, isto é, não está relacionada com a separação de cargas no espaço (associada ao trabalho realizado pelas forças coulombianas) como definido pelas equações da seção 3.1, mas que também correspondente à aplicação do conceito de capacitância definido na Eq. (1).

Além disso, pode-se notar a partir da Eq. (12) que a relação dn/dE corresponde a definição de densidade de estados, ou seja, o número de estados quânticos n por

intervalo de energia E (Mintmire; White, 1998). Portanto, C_q é uma capacitância que se correlaciona diretamente com a estrutura eletrônica de moléculas e compostos.

3.3 O CONCEITO DE CONCEPÇÕES ALTERNATIVAS

O conceito de concepções alternativas está associado à errônea compreensão de ideias de maneira equivocada (Thompson, 2016), de modo que, nas palavras de Pozo e Crespo (1998), este tem origem associada em uma:

“desconexão entre o conhecimento que os alunos geram para dar sentido ao mundo que os rodeia, um mundo de objetos e pessoas, e o conhecimento científico, repleto de símbolos estranhos e conceitos abstratos referentes a um mundo mais imaginário do que real” (Pozo; Crespo, 1998, p.89, tradução livre)⁴,

Ora, as ideias com relação a este conceito surgem por voltas dos anos de 1970, com as primeiras pesquisas voltadas com relação a preocupação das noções que os alunos traziam consigo, assim, por volta de 1980, e, atrelado ao MCA (movimento das Concepções Alternativas), este conceito se torna mais discutido e ganha relevância no contexto do ensino de ciências, inclusive com a definição de que os alunos dificilmente abandonam essas concepções. (Leão; Kalhil, 2015; Silva; Amaral, 2016).

Neste contexto, Pozo e Crespo (1998) ainda propõem três diferentes origens dessas concepções, sendo elas: Origem sensorial, associada à uma espontaneidade; Origem cultural, associada com as interações do aluno com o mundo não material, isto é, com o contexto social e cultural deste; E a origem escolar, no qual as representações equivocadas utilizadas pelos professores podem reforçar as concepções dos alunos (Silva; Amaral, 2016).

Deste modo, tem-se que as concepções influenciam diretamente em como os estudantes aprendem novos conhecimentos científicos (Özmen, 2004), de modo que pode-se compreender as dificuldades dos alunos se forem compreendidas as

⁴ la desconexión entre el conocimiento que los alumnos generan para dar sentido al mundo que les rodea, un mundo de objetos y personas, y el conocimiento científico, plagado de extraños símbolos y conceptos abstractos referidos a un mundo más imaginario que real

maneiras pelas quais as suas percepções se diferem nos contextos educacionais (Carter; Brickhouse, 1989).

Essas ideias se apresentam com base nas experiências pessoais dos alunos (Thompson, 2016), no sentido que podem ser encontradas num estado “puro”, isto é, resultado de uma generalização da experiência, como também influenciados pela sala de aula, isto é, uma informação aprendida na ciência que está inapropriadamente ligada a uma concepção existente (Klopfer; Champagne; Gunstone, 1983).

Klopfer, Champagne e Gunstone (1983, p. 176) ilustram essa relação por meio do exemplo da gravidade, no qual a forma pura se encontra na frase “Objetos mais pesados caem mais rápido que os mais leves” (tradução livre)⁵ e a forma influenciada pela sala de aula acrescenta uma justificativa “Objetos mais pesados caem mais rápido do que os mais leves porque a gravidade puxa com mais força os objetos mais pesados” (tradução livre)⁶.

Deste modo, tem-se que as concepções não estão somente associadas às ideias externas à escolaridade, mas sim, a outros parâmetros como mal-entendidos conceituais (Thompson, 2016), vez que o equívoco existente, como para o exemplo da gravidade, é reforçado pois é consistente com uma proposição vista como um fato científico (Klopfer; Champagne; Gunstone, 1983).

Este cenário é mais agravante quando analisado com relação à eletroquímica, no qual se confirma o diagnóstico de influência das concepções na aprendizagem, entretanto há o adicional de que os alunos identificam a eletroquímica como uma matéria difícil (Sanger; Greenbowe, 1997).

Neste contexto da eletroquímica, Chia, Hölttä-Otto e Anariba (2022) descrevem que as origens das concepções alternativas podem ser atribuídas a quatro fatores, sendo estes o “conhecimento anterior inadequado”, o “uso de múltiplas terminologias”, o “uso de linguagem descritiva imprecisa nos livros didáticos” e a “falta de explicação dos fenômenos”.

Com relação ao conhecimento anterior inadequado, Özkaya (2002) considera em seu trabalho que “as origens das dificuldades de aprendizagem foram atribuídas principalmente à incapacidade de adquirir conhecimentos conceituais adequados

⁵ Heavier objects fall faster than lighter ones

⁶ Heavier objects fall faster than lighter ones because gravity pulls harder on heavier objects

sobre eletroquímica” (tradução livre)⁷, de modo que este ainda pode estar relacionado com a linguagem e a conceitualização utilizada nos livros didáticos.

Por sua vez, o uso de múltiplas terminologias é apresentado como um fator que auxilia na origem e na manutenção das concepções, de modo que o uso de uma terminologia correta, ou, que seja pensada no contexto das concepções, pode por sua vez auxiliar na superação destas (Birss; Truax, 1990).

Ora, como exemplo desta problemática pode-se ilustrar o uso de uma mesma nomenclatura aplicada para descrição de diferentes propriedades da matéria, como para o caso das convenções dos sinais eletroquímicos associados à termodinâmica e à eletrostática (Maloy, 1985).

O terceiro item a ser explorado é o “uso de linguagem descritiva imprecisa nos livros didáticos”, que neste contexto pode ser considerado como uma das principais causas de concepções alternativas (Birss; Truax, 1990; Ogude; Bradley, 1994; Özkaya, 2002; Sanger; Greenbowe, 1997).

Como exemplo desta problemática, Sanger e Greenbowe (1997) consideram em seu trabalho que “A análise dos livros didáticos usados por nossos alunos sugere uma fonte desses equívocos: erros óbvios ou declarações enganosas nos textos, que podem ser mal interpretados ou generalizados demais para situações inadequadas” (Sanger; Greenbowe, 1997, p. 822, tradução livre)⁸.

Por fim, para abordar a falta de explicação dos fenômenos, é este item com a afirmação de Maloy (1985) no qual considera que “o estudo da eletroquímica também nos oferece uma oportunidade única de investigar a interação entre fenômenos químicos e físicos em um nível fundamental” (Maloy, 1985, p.1018, tradução livre)⁹.

A partir desta afirmação, considerando essa interface entre a física e a química, os fenômenos exigem de maior explicação e articulação entre níveis (Velleca *et al*,

⁷ The origins of the learning difficulties were attributed mainly to failure to acquire adequate conceptual knowledge about electrochemistry

⁸ Analysis of the textbooks used by our students suggests a source of these misconceptions: obvious mistakes or misleading statements in the texts, which can be misinterpreted or over-generalized to inappropriate situations

⁹ the study of electro-chemistry also provides us with a unique opportunity to investigate the interplay between chemical and physical phenomena at a fundamental level

2005), de modo que a ausência destas pode contribuir para origem e manutenção das concepções, como demonstra Ogude e Bradley (1994) ao considerar que:

Aspectos de condução no eletrólito, neutralidade elétrica, processos de eletrodo e fem celular e corrente são complexos e entrelaçados e não podem ser entendidos isoladamente uns dos outros. Uma estratégia instrucional destinada a aliviar esses mal-entendidos deve, portanto, adotar uma abordagem onde a célula possa ser compreendida em sua totalidade. (Ogude; Bradley, 1994, p.33, tradução livre)¹⁰.

Assim, os quatros itens mencionados demonstram uma persistente existência das concepções alternativas na eletroquímica, de modo que uma nova abordagem conceitual e metodológica é necessária (Velleca *et al*, 2005).

¹⁰ Aspects of conduction in the electrolyte, electrical neutrality, electrode processes and Cell electromotive force and current are complex and interwoven and cannot be understood in isolation from each other. An instructional strategy aimed at alleviating these misunderstandings should thus adopt an approach where the cell can be understood in its entirety.

4 DESENVOLVIMENTO

Na seção anterior foi possível relacionar o conceito da capacitância do ponto de vista eletrostático e do ponto de vista químico, o primeiro vindo das contribuições associada a lei de Gauss e o segundo proveniente das contribuições associada a lei de Faraday, nesse sentido, apresentamos o conceito de *misconceptions* e seu entendimento no âmbito da eletroquímica associado ao incompleto entendimento do conceito de capacitância e a sua associação com energia eletrostática e química.

Assim, a presente seção, sendo a principal deste trabalho, está dividida entre a introdução do conceito de capacitância eletroquímica, a relação deste conceito com os de reatividade química.

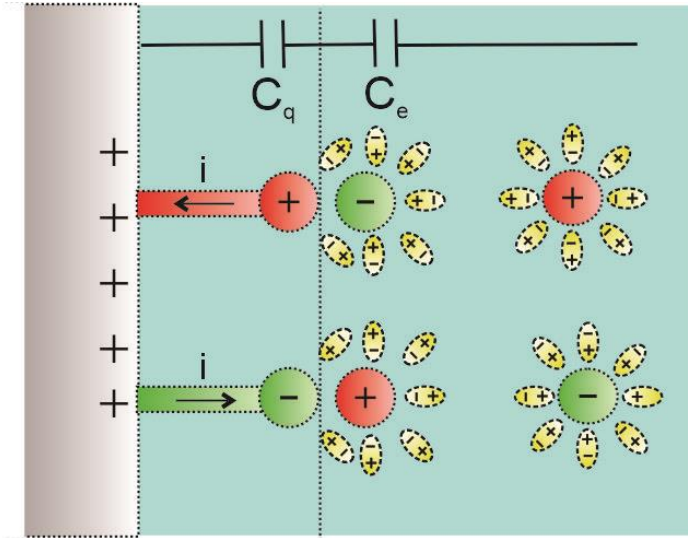
4.1 INTRODUÇÃO AO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA

Para a introduzir o conceito de capacitância eletroquímica, é necessário antes entender que há duas contribuições capacitivas que podem ser relacionadas em série, correspondente as contribuições eletrostática e química, discutidas anteriormente.

Observe que para um sistema eletroquímico, a explicação do mecanismo de reação redox pode ser realizada por meio dos conceitos de doador D e aceitador A de elétrons, ou seja, a reação de oxidação e redução (Sánchez; Santos; Bueno, 2022a) pode ser expressa em termos de doador e aceitador. Por exemplo, o agente oxidante sendo aquele que doa os elétrons enquanto o agente redutor aquele que recebe.

Assim uma reação ou dinâmica $D \rightarrow A$ pode ser descrita de forma a conter duas contribuições de carga diferentes, uma associada a separação espacial de cargas, o que nos conduz aos efeitos eletrostáticos, e ao efeito de ocupação de estados quânticos que se relaciona a estrutura eletrônica de $D \rightarrow A$, que irão, por vezes, diferir entre si, apenas pela diferença de uma carga elementar e aqui é onde se estabelece o conceito químico de capacitância ou de potencial químico que se relaciona ao elétrico, mas são de naturezas distintas. A Figura 4 abaixo ilustra o caso da aplicação deste conceito a uma reação redox em uma interface eletroquímica, onde $D \rightarrow A$ estão ancorados a um metal com o qual troca elétrons.

.Figura 4: ilustração de um sistema eletroquímico com as respectivas contribuições de capacitância quântica e eletrostática.



Fonte: elaborado pela Autor (2024).

A Figura 4 apresenta a ilustração de uma interface eletroquímica em que há a contribuição eletrostática e química para a capacitância equivalente da interface, que no caso é a capacitância eletroquímica.

Neste sentido, a Figura 4 demonstra que há uma relação entre os níveis de energia da espécie ancorada e o metal e isto induz a um movimento dinâmico entre os elétrons no metal e na espécie ancorada. A ocupação dos estados quânticos nas espécies ancoradas exige que íons presentes na solução atuem no sentido de neutralizar o efeito de campo promovido pela ocupação dos elétrons nas espécies ancoradas.

Assim, a capacitância resultante deste processo é uma soma da contribuição eletrostática decorrentes da separação de cargas, ilustrada na Figura 4 por C_e , e as contribuições quânticas decorrentes da ocupação dos níveis de energia, ilustrada por C_q . A capacitância equivalente da interface é denominada de capacitância eletroquímica, sendo o resultado da combinação em série, que em termos de energia, pode ser denotado como a soma das contribuições eletrostática e química para uma mesma quantidade de carga elementar, ou seja:

$$\frac{e^2}{C_\mu} = \frac{e^2}{C_e} + \frac{e^2}{C_q} \quad (13)$$

É interessante observar que as contribuições capacitivas provêm de duas leis diferentes, isto é, da lei de Gauss e da lei de Faraday, como visto na introdução dos conceitos de capacitância eletrostática e química, neste sentido, quando o sistema está em equilíbrio podemos considerar que as contribuições C_e e C_q como estando em um mesmo nível de energia, ou seja, em degenerescência.

Deste modo, tem-se que nestas condições $C_q = C_e$ e podemos considerar um fator de degenerescência $g_e = 2$ na relação entre as capacitâncias na definição de energia da Eq. (13), como mostrado a seguir:

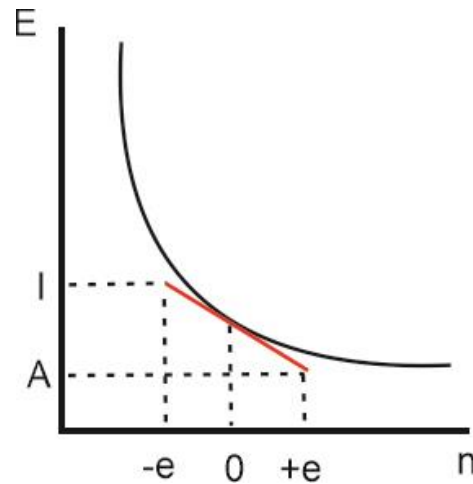
$$E_\mu = g_e \frac{e^2}{C_q} = \frac{2 e^2}{C_q} = \frac{2 e^2}{C_e}, \quad (14)$$

onde E_μ é a energia total equivalente e denominada energia eletroquímica.

4.2 O USO DO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NA APRESENTAÇÃO CONCEITO DE REATIVIDADE

Anteriormente, vimos que a capacitância quântica pode ser relacionada ao potencial químico μ eletrônico, assim como este está relacionado às energias de afinidade, ionização e HOMO-LUMO, assim, também foi demonstrado que em sistemas eletroquímicos, poderíamos atribuir contribuições de capacitância eletrostática e química e que na condição de equilíbrio dinâmico estas estão em sobreposição (degeneradas). Nesta seção demonstraremos como a reatividade pode ser mensurável a partir do conceito de capacitância eletroquímica, sendo necessário analisar o conceito de reatividade e sua relação com a energia da reação, como mostrada na Figura 5 abaixo para sistemas atômicos.

Figura 5: Relação entre energia e o número de elétrons adicionados ou removidos em sistema atômico.



Fonte: elaborado pela Autor (2024).

A Figura 5 demonstra uma representação gráfica da relação entre energia (eixo y) e número de elétrons em um átomo (eixo x), para o eixo y são identificados os níveis de energia relativos à energia de ionização e afinidade, e, para o eixo x são identificados um número inteiro de elétrons.

Através desta figura é possível entender que o aumento ou a redução de elétrons em um átomo está relacionado diretamente com a energia, de modo que o potencial químico é a tangente que correlaciona estes fatores (Pearson, 2005). Neste sentido, o resultado dessa relação energética entre afinidade e ionização, isto é, a diferença entre estes compostos, são descritas por lafrate, Hess, Krieger e Macucci (1995) considerando um sistema de N elétrons na seguinte equação:

$$\frac{e^2}{C(N)} = I(N) - A(N) \quad (15)$$

Em complemento, Bueno, Feliciano e Davis (2015) demonstram que o termo de capacitância para um sistema de N elétrons podem ser atribuído para a capacitância quântica, de modo a equação se adapta para:

$$\frac{e^2}{C_q(N)} = I(N) - A(N) \quad (16)$$

Neste contexto, a diferença entre a ionização e a afinidade dispostas nas Eqs. (15) e (16) podem ser correlacionadas com um parâmetro chamado dureza química, representado pela letra grega χ , de modo que, este conceito também se relaciona com a eletronegatividade, representado pela letra grega η , no qual ambos são correlacionados por Lafrate, Hess, Krieger e Macucci (1995) nas seguintes equações:

$$\eta = \frac{1}{2}(I - A) \quad (17)$$

$$\chi = \frac{1}{2}(I + A) \quad (18)$$

Pearson (2005, p.373), como exemplo, ilustra que essa relação entre dureza química, eletronegatividade e reatividade possibilita concluir que “que moléculas moles serão mais reativas do que moléculas duras para reações unimoleculares, como isomerização e dissociação” (Pearson, 2005, p.373, tradução livre¹¹).

Deste modo, relacionando o conceito de eletronegatividade com a reatividade, tem-se que podemos associar a energia capacitiva química do elétron, e as propriedades químicas do sistema (Bueno; Feliciano; Davis, 2015), a partir de uma relação entre as Eqs. (16) e (18), e, de uma mudança do parâmetro de capacitância eletroquímica por capacitância quântica e um fator de degenerescência. Assim, é possível relacionar a reatividade deste sistema diretamente com a capacitância quântica:

$$I(N) = \chi(N) + \frac{e^2}{2C_q(N)} \quad (19)$$

Portanto, o acesso destes parâmetros via medição da capacitância quântica permite uma atribuição de valor definido para o parâmetro de reatividade por meio do conceito de eletronegatividade e/ou dureza química, ou seja, é possível diferenciar, em valores definidos de capacitância quântica, matematicamente quantificável, reatividade de sistema químicos de maneira precisa e definida, desde que seguindo as condições ferramentais para tanto.

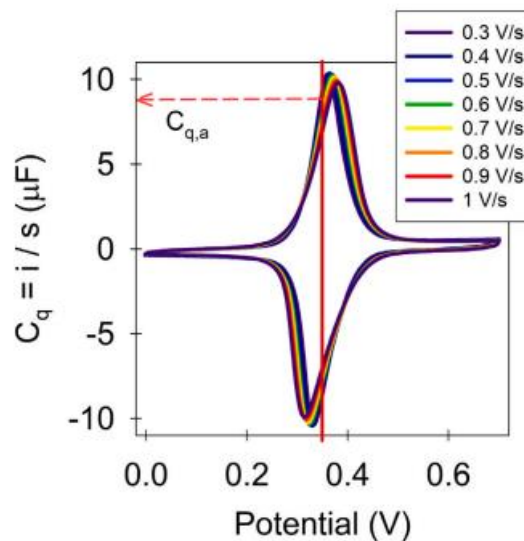
¹¹ we can conclude that soft molecules will be more reactive than hard molecules for unimolecular reactions such as isomerization and dissociation.

4.2.1 Condições para correlacionar a capacitância eletroquímica e a reatividade

No item 4.2 foi definida a relação entre a reatividade e os parâmetros de capacitância, nesta seção, será abordada as condições ferramentais para a obtenção dessa correlação.

O primeiro requisito abordado anteriormente para a correlação é a análise em condições de equilíbrio dinâmico, que para reações eletroquímicas, pode ser explicitado pela medição de voltametria cíclica, que permite o acesso ao potencial formal, isto é, ao potencial de equilíbrio do sistema, por meio da média entre os potenciais de oxidação e de redução acessados (Kissinger; Heineman, 1983; Alarcón; Santos; Bueno, 2021), como mostra a Figura 6.

Figura 6: Voltametria cíclica aplicada em diferentes velocidades.

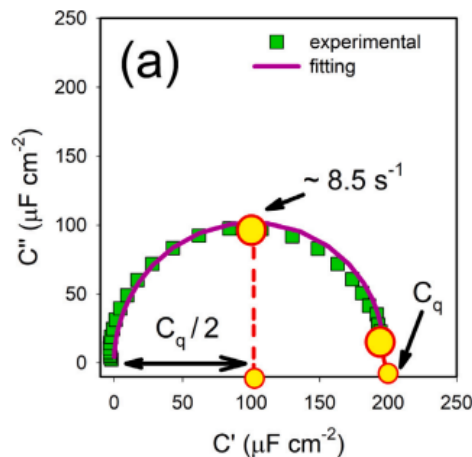


Fonte: (Bueno, 2023)

A Figura 6 apresenta uma voltametria cíclica aplicada em diferentes velocidades de varredura em um sistema equivalente ao da Figura 4. Nesta técnica, os picos superiores estão associados com os processos oxidativos do sistema, enquanto os picos inferiores estão associados com os processos de redução do sistema (Kissinger; Heineman, 1983).

Dado o potencial formal, a condição de equilíbrio do sistema foi atendida, neste sentido, para obter a capacitância eletroquímica, é necessário realizar uma perturbação no sistema para se analisar sua devida resposta. Esta perturbação é feita por meio da aplicação de um potencial senoidal ao redor do potencial formal na qual há variação e varredura da frequência senoidal (Garrote; Santos; Bueno, 2019), cujo resultado é mostrado na Figura 7, denominado diagrama de Nyquist capacitivo.

Figura 7: Espectroscopia de capacitância eletroquímica derivada de impedância aplicada no potencial formal e que permite a mensuração da capacitância quântica.



Fonte: (Bueno, 2023)

A Figura 7 apresenta uma espectroscopia de capacitância derivada de impedância em potencial definido, o gráfico apresenta a resposta obtida para os parâmetros aplicados e identifica um ponto ao pico do semicírculo e um ponto ao final do semicírculo.

Através da impedância, o sistema é perturbado com o potencial e a varredura de frequência para que o estado de equilíbrio seja minimamente alterado (Bredar; Chown; Burton; Farnum, 2020), como resposta, o sistema tende a retornar ao equilíbrio inicial, causando uma resposta conhecida como relaxamento (Sánchez; Santos; Bueno, 2022a).

Este processo está definido ao longo do semicírculo observado na Figura 7, de modo que o pico do semicírculo é o ponto de ressonância do sistema e o final do semicírculo está relacionado com o retorno ao equilíbrio (Sánchez; Santos; Bueno, 2022b).

A capacitância (Alarcón; Santos; Bueno, 2021), que é observada na Figura 7 se correlaciona diretamente com a análise do processo com os parâmetros teóricos apresentados anteriormente.

4.3 O USO DO CONCEITO DE CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA NA FORMULAÇÃO DO CONCEITO DE CONSTANTE DE VELOCIDADE DE REAÇÃO

Anteriormente foi possível relacionar capacitância eletroquímica com reatividade e como medir essa reatividade, agora entenderemos como a constante de velocidade de reação eletroquímica pode ser definida a partir da capacitância eletroquímica.

O conceito de velocidade de reação é explorado classicamente associado a um fator inerente ao sistema, denominado uma constante k , bem como as concentrações dos compostos presentes no sistema. Nesse sentido, consideremos um sistema clássico cuja taxa de reação é descrita por uma reação $A + B \rightarrow C$ como $v = k[A][B]$ para a formação de produtos e $v = k[C]$ para a formação de reagentes (Mysels, 1956).

É importante considerar, portanto, que a velocidade é definida pelo valor intrínseco característico da reação e da probabilidade de que A e B se reacionem para a formação C, ora, por parâmetro matemático, a concentração está relacionada com esta probabilidade, isto é, quanto maior a concentração, maior a chance de que A e B reacionem para a formação de C.

Por sua vez, quando voltamos ao sistema da Figura 4, e, com base na mensurabilidade descrita, pode-se perceber uma dinâmica semelhante associada à transferência de elétrons entre a espécie ancorada e o metal.

Ora, a dinâmica deste processo considera as concentrações das espécies, tal como no modelo clássico, e, um fator probabilístico associado a transferência dos elétrons, isto é, a probabilidade da saída ou chegada de carga no metal, descrito por $M^+ + e^- \rightarrow M$ e $M \rightarrow M^+ + e^-$, bem como uma probabilidade de chegada e/ou saída de carga nas espécies ancoradas.

Desta forma, a velocidade de reação será descrita pela natureza da carga em movimento entre os níveis de energia das espécies ancoradas e os níveis de energia

daquelas no metal e a probabilidade de transmissão desta carga (BUENO, 2020), de modo que temos:

$$k = G_0 \sum T_n \left(\frac{1}{C_q} + \frac{1}{C_e} \right) \quad (20)$$

No qual o fator $G_0 = 2e^2/h$ é o quantum de condutância, o fator T_n diz respeito à transmitância em n canais quânticos e está associado com a probabilidade de movimento de elétrons, e como visto anteriormente, as contribuições capacitivas quânticas vêm da natureza eletrônica do material e da estabilização de carga vindo dos íons em solução (Bueno, 2020; Bueno, 2023).

A Eq. (20) é denominada de taxa quântica e pode ser simplificada considerando um máximo fator de condutância (1) e em condições de equilíbrio nas quais capacitâncias eletrostáticas e quânticas são equivalentes (Alarcón; Santos; Bueno, 2021), o que conduz a uma simplificação da Eq. (20) para

$$k = \frac{G}{C_\mu} \quad (21)$$

onde $G = G_0 \sum T_n$ é condutância quântica. Assim, tem-se que a taxa quântica está diretamente relacionada com o fator k cinético clássico descrito anteriormente, de modo que por meio da capacitância eletroquímica pode se explicar e estabelecer uma relação direta que explica a constante de velocidade de reação eletroquímica.

4.4 O CONCEITO DE CONCEPÇÕES ALTERNATIVAS ASSOCIADO À CAPACITÂNCIA ELETROQUÍMICA

Dado o conceito de capacitância, e como este pode ressignificar conceitos clássicos da química, é de sumo interesse analisar as relações educacionais associadas a este conceito.

Ora, a definição de concepções alternativas está associada com a ideia de um padrão sistemático de erros associado ao processo de ensino-aprendizagem, este, é de extrema importância uma vez que a análise destes padrões permite um avanço na prática educacional e da forma de se pensar a ciência e aplicá-la.

É importante notar que os estudos sobre as concepções alternativas ainda não foram aplicados à capacitância eletroquímica, e atribui-se a esta questão o fato de que o desenvolvimento do conceito da capacitância eletroquímica é recente e está associado inicialmente com necessidades de pesquisa e de níveis pós-graduacionais, no sentido de que para níveis de graduação, está associado somente a componente eletrostática.

Entretanto, tem-se como base os trabalhos realizados em temas correlatos e principalmente nas bases necessárias para o entendimento da capacitância eletroquímica, como exemplo, o fato de que alunos podem apresentar dificuldade em usar potenciais de redução padrão para prever a direção das reações químicas (Sanger; Greenbowe, 1997).

Ora, ocorre que além das percepções encontradas para as bases do entendimento da capacitância eletroquímica, tem-se que a problemática capacitiva explorada anteriormente como um processo de associação clássica e quântica é um fator crucial no ensino da eletroquímica.

Se retomarmos as origens das concepções alternativas veremos que o quarto item diz respeito a falta de explicação dos fenômenos, e neste sentido, a explicação do fenômeno eletroquímico somente pela via eletrostática pode induzir ao aluno a percepção de que a natureza do sistema não possui contribuições quânticas e não se trata de uma relação entre contribuições (eletrostática e quântica).

Neste contexto, podemos considerar que a não relação entre estes componentes é, na realidade, um erro que desconsidera a realidade das reações eletroquímicas e as definições capacitivas deste processo, de modo que não relacionar ambas as contribuições podem ser atribuídas como deficiência na formação de um dos padrões sistemáticos associados anteriormente.

Portanto, não abordar esse conjunto clássico-quântico é privar o aluno da completude da natureza do sistema eletroquímico, e, privar os alunos das relações que este sistema produz, como para reatividade e velocidade de reação. Ora, dado o contexto de novas produções tecnológicas baseadas no conceito de capacitância eletroquímica, como a produção de biossensores, neste processo também está se privando os alunos da compreensão dessas novas produções e conseqüentemente, do estímulo de futuras produções e desenvolvimento científico.

5 CONCLUSÃO

Conclui-se que o conceito de capacitância nos permite explorar com precisão os conceitos de reatividade, velocidade de reação, eletronegatividade e outros conceitos relacionados que são extremamente necessários para a compreensão do comportamento dos sistemas químicos.

Além disso, pode-se observar que a capacitância eletroquímica permite a medição de fatores teóricos previamente estabelecidos que apresentam dificuldade de medição em quesitos práticos por outros meios.

Neste ponto, entende-se que existem inúmeros outros fatores explorados neste trabalho de modo que a capacitância não está apenas relacionada com aquelas discutidas anteriormente, mas com todas as quais as relações físico-químicas permitem inferir resultados através da espectroscopia.

Assim, urge a necessidade do ensino do conceito de capacitância em sua completude para o nível superior, vez que se verifica a efetiva necessidade de não permitir a criação destes padrões sistemáticos errôneos e danosos ao processo de ensino-aprendizagem.

Portanto, conclui-se que é necessário apresentar aos alunos o conceito de capacitância eletroquímica como forma de introduzir o componente quântico na discussão do conceito de capacitância, para que seja apresentado o conteúdo completo e não apenas um dos pontos de vista, isto é, é necessário apresentar a totalidade da natureza do contexto eletroquímico de modo a permitir que o aluno tenha total noção dos mecanismos que governam este sistema.

6 REFERÊNCIAS

ALARCÓN, Erika Viviana Godoy; SANTOS, Adriano; BUENO, Paulo Roberto. Perspective on quantum electrochemistry. A simple method for measuring the electron transfer rate constant. **Electrochimica Acta**, [S.L.], v. 398, p. 139219, dez. 2021. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2021.139219>.

AVELINO, Karen Y.P.s. *et al.* Nanostructured sensor platform based on organic polymer conjugated to metallic nanoparticle for the impedimetric detection of SARS-CoV-2 at various stages of viral infection. **Journal Of Pharmaceutical And Biomedical Analysis**, [S.L.], v. 206, p. 114392, nov. 2021. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jpba.2021.114392>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0731708521005033>. Acesso em: 07 abr. 2024.

BECKER, Peter. History and progress in the accurate determination of the Avogadro constant. **Reports On Progress In Physics**, [S.L.], v. 64, n. 12, p. 1945-2008, 16 nov. 2001. IOP Publishing. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/64/12/206>.

BINNINGER, Tobias. First-principles theory of electrochemical capacitance. **Electrochimica Acta**, [S.L.], v. 444, p. 142016, mar. 2023. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142016>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468623002037>. Acesso em: 1 mar. 2024.

BIRSS, Viola I.; TRUAX, D. Rodney. An effective approach to teaching electrochemistry. **Journal Of Chemical Education**, v. 67, n. 5, p. 403, maio 1990. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed067p403>. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed067p403>. Acesso em: 7 mar. 2024.

BUENO, Paulo R.; DAVIS, Jason J.. Measuring Quantum Capacitance in Energetically Addressable Molecular Layers. **Analytical Chemistry**, v. 86, n. 3, p. 1337-1341, 16 jan. 2014. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ac403135b>.

BUENO, Paulo R.; FELICIANO, Gustavo T.; DAVIS, Jason J.. Capacitance spectroscopy and density functional theory. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 17, n. 14, p. 9375-9382, 2015. Royal Society of Chemistry (RSC). <http://dx.doi.org/10.1039/c4cp06015f>.

BUENO, Paulo Roberto. Electron transfer and conductance quantum. **Physical Chemistry Chemical Physics**, [S.L.], v. 22, n. 45, p. 26109-26112, 2020. Royal Society of Chemistry (RSC). <http://dx.doi.org/10.1039/d0cp04522e>.

BUENO, Paulo R. Nanoscale origins of super-capacitance phenomena. **Journal Of Power Sources**, v. 414, p. 420-434, fev. 2019. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2019.01.010>.

BUENO, Paulo Roberto *et al.* The density-of-States and equilibrium charge dynamics of redox-active switches. **Electrochimica Acta**, v. 387, p. 138410, ago. 2021. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138410>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468621007003>.. Acesso em: 03 abr. 2024.

BUENO, Paulo R.. Quantum rate theory and electron-transfer dynamics: a theoretical and experimental approach for quantum electrochemistry. **Electrochimica Acta**, v. 466, p. 142950, out. 2023. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142950>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468623011258>. Acesso em: 15 mar. 2024.

CARTER, Carolyn S.; BRICKHOUSE, Nancy W. What makes chemistry difficult? Alternate perceptions. **Journal Of Chemical Education**, [S.L.], v. 66, n. 3, p. 223, mar. 1989. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed066p223>.

CHAMBERS, James Q. Electrochemistry in the general chemistry curriculum. **Journal Of Chemical Education**, v. 60, n. 4, p. 259, abr. 1983. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed060p259>. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed060p259>. Acesso em: 7 mar. 2024.

CHIA, Vanessa Y. Y.; HÖLTTÄ-OTTO, Katja; ANARIBA, Franklin. Using the Electrochemistry Designette to Visualize Students' Competence and Misconceptions on Electrochemical Principles. **Journal Of Chemical Education**, [S.L.], v. 99, n. 3, p. 1533-1538, 13 jan. 2022. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c00773>.

CONWAY, B. E.; SALOMON, Mark. Electrochemistry: its role in teaching physical chemistry. **Journal Of Chemical Education**, v. 44, n. 10, p. 554, out. 1967. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed044p554>. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ed044p554>. Acesso em: 12 mar. 2024.

GUEDES, Manuel Vaz. **O Fenómeno Eléctrico: algumas ideias e experiências**. 2003. 20 f. Texto de apoio – Curso de História e Filosofia das Ciências, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto, 2003. Disponível em: <http://paginas.fe.up.pt/histel/FenomEl.pdf>. Acesso em: 09 dez. 2024.

HEERENS, W -C. Application of capacitance techniques in sensor design. **Journal Of Physics e: Scientific Instruments**, v. 19, n. 11, p. 897-906, nov. 1986. IOP Publishing. <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3735/19/11/002>.

IAFRATE, G. J.; HESS, K.; KRIEGER, J. B.; MACUCCI, M.. Capacitive nature of atomic-sized structures. **Physical Review B**, v. 52, n. 15, p. 10737-10739, 15 out. 1995. American Physical Society (APS). <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.52.10737>.

KISSINGER, Peter T.; HEINEMAN, William R.. Cyclic voltammetry. **Journal Of Chemical Education**, v. 60, n. 9, p. 702, set. 1983. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed060p702>.

KLOPFER, Leopold E.; CHAMPAGNE, Audrey B.; GUNSTONE, Richard F.. Naive Knowledge and Science Learning. **Research In Science & Technological Education**, [S.L.], v. 1, n. 2, p. 173-183, jan. 1983. Informa UK Limited. <http://dx.doi.org/10.1080/0263514830010205>.

LEÃO, Núbia Maria de Menezes; KALHIL, Josefina Barrera. Concepções alternativas e os conceitos científicos:: uma contribuição para o ensino de ciências. **Latin-American Journal Of Physics Education**, [s. l], v. 9, n. 4, dez. 2015.

LIMA, Handerson Rodrigues Silva; SILVA, Josany Saibrosa da; FARIAS, Emanuel Airton de Oliveira; TEIXEIRA, Paulo Ronaldo Sousa; EIRAS, Carla; NUNES, Lívio César Cunha. Electrochemical sensors and biosensors for the analysis of antineoplastic drugs. **Biosensors And Bioelectronics**, [S.L.], v. 108, p. 27-37, jun. 2018. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.bios.2018.02.034>.

MALOY, J. T.. Goals in teaching electrochemistry. **Journal Of Chemical Education**, [S.L.], v. 62, n. 11, p. 1018, nov. 1985. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed062p1018.2>.

MINTMIRE, J. W.; WHITE, C. T.. Universal Density of States for Carbon Nanotubes. **Physical Review Letters**, [S.L.], v. 81, n. 12, p. 2506-2509, 21 set. 1998. American Physical Society (APS). <http://dx.doi.org/10.1103/physrevlett.81.2506>.

NALEWAJSKI, Roman F.. On geometric concepts in sensitivity analysis of molecular charge distribution. **International Journal Of Quantum Chemistry**, v. 42, n. 2, p. 243-265, 20 abr. 1992. Wiley. <http://dx.doi.org/10.1002/qua.560420202>.

NGUYEN, Quoc Hai; LE, Thi Hoa; TRAN, Quang Nhat. Quantum dots as fabricating materials for supercapacitors. **Journal Of Alloys And Compounds**, v. 985, p.

173947, maio 2024. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2024.173947>.

Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838824005346>. Acesso em: 2 abr. 2024.

OGUDE, A. N.; BRADLEY, J. D.. Ionic Conduction and Electrical Neutrality in Operating Electrochemical Cells: pre-college and college student interpretations. **Journal Of Chemical Education**, [S.L.], v. 71, n. 1, p. 29, jan. 1994. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed071p29>.

ÖZMEN, Haluk. Some Student Misconceptions in Chemistry: a literature review of chemical bonding. **Journal Of Science Education And Technology**, v. 13, n. 2, p. 147-159, jun. 2004. Springer Science and Business Media LLC. <http://dx.doi.org/10.1023/b:jost.0000031255.92943.6d>.

PEARSON, Ralph G.. Chemical hardness and density functional theory. **Journal Of Chemical Sciences**, v. 117, n. 5, p. 369-377, set. 2005. Springer Science and Business Media LLC. <http://dx.doi.org/10.1007/bf02708340>.

PEARSON, Ralph G.. Maximum Chemical and Physical Hardness. **Journal Of Chemical Education**, v. 76, n. 2, p. 267, fev. 1999. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed076p267>.

PERKINS, Ronald I.. Electrochemistry. **Journal Of Chemical Education**, v. 62, n. 11, p. 1018, nov. 1985. American Chemical Society (ACS). 18 <http://dx.doi.org/10.1021/ed062p1018.1>. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ed062p1018.1>. Acesso em: 2 abr. 2024.

PINZÓN, Edgar F.; SANTOS, Adriano dos; BUENO, Paulo R.. Density of States of a Nanoscale Semiconductor Interface as a Transduction Signal for Sensing Molecules. **Acs Applied Electronic Materials**, [S.L.], v. 3, n. 8, p. 3411-3417, 29 jul. 2021. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/acsaelm.1c00387>.

POZO, J.I.M.; CRESPO, M.A.G. Aprender y enseñar ciência: del conocimiento cotidiano al conocimiento científico. Madrid: Morata, 1998.

SÁNCHEZ, Yuliana Pérez; SANTOS, Adriano; BUENO, Paulo Roberto. Quantum Mechanical Meaning of the Charge Transfer Resistance. **The Journal Of Physical Chemistry C**, v. 126, n. 6, p. 3151-3162, 3 fev. 2022. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c07801>.

SÁNCHEZ, Yuliana Pérez; SANTOS, Adriano; BUENO, Paulo Roberto. Quantum rate efficiency of the charge transfer mediated by quantum capacitive

states. **Electrochimica Acta**, v. 434, p. 141194, dez. 2022. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2022.141194>.

SANGER, Michael J.; GREENBOWE, Thomas J.. Students' Misconceptions in Electrochemistry Regarding Current Flow in Electrolyte Solutions and the Salt Bridge. **Journal Of Chemical Education**, v. 74, n. 7, p. 819, jul. 1997. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ed074p819>.

SILVA, João R. R. T. da; AMARAL, Edenia M. R. do. Concepções sobre Substância: relações entre contextos de origem e possíveis atribuições de sentidos. **Química Nova na Escola**, [S.L.], v. 38, n. 1, p. 70-78, fev. 2016. Sociedade Brasileira de Química (SBQ). <http://dx.doi.org/10.5935/0104-8899.20160011>.

THOMPSON, Fiona; LOGUE, Sue. An exploration of common student misconceptions in science. **International education journal**, v. 7, n. 4, p. 553-559, 2006.

VELLECA R. F. *et al.* Investigando as concepções alternativas dos estudantes sobre eletroquímica. Associação brasileira de pesquisa em educação em ciências – atas do V enpec. N° 5. 2005.