Universidade de São Paulo

Instituto de Física

Instituto de Química

Instituto de Biociências

Faculdade de Educação

Anielli Fabiula Gavioli Lemes

**Aspectos filosóficos e educacionais da
química:**

***investigando as concepções de doutorandos em
química***

São Paulo

2013

ANIELLI FABIULA GAVIOLI LEMES

**Aspectos filosóficos e educacionais da
química:**

***investigando as concepções de doutorandos em
química***

Dissertação apresentada ao Instituto de Física, Instituto de Química, Instituto de Biociências e a Faculdade de Educação da Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Ensino de Ciências, modalidade Química.

Orientador: Paulo Alves Porto

São Paulo

2013

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Lemes, Anielli Fabiula Gavioli

Aspectos filosóficos e educacionais da química: investigando
as concepções de doutorandos em química. – São Paulo,
2013.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo.
Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química
e Instituto de Biociências

Orientador: Prof. Dr. Paulo Alves Porto

Área de Concentração: Química

Unitermos: 1. Ensino; 2. Química (Estudo e Ensino); 3.
Filosofia da Ciência.

USP/IF/SBI-035/2013

Ao meu marido e minha
mãe, que são as
influências fundamentais
de quem eu me tornei,
refletindo no que faço.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao Prof. Dr. Paulo, que foi mais que orientador nessa dissertação; foi um admirável guia no meu início à grande jornada na academia em todos os sentidos. Como falo a todos, cheguei até aqui, pois segui suas sugestões e conselhos. Espero que algum dia eu consiga saber as palavras certas e as horas certas de se falar e escrever como você.

Obrigada a minha família, Allison, Silvio, Néia, Mara e Márcia por me estarem sempre presentes na minha vida pessoal, especialmente a minha mãe e ao Carlos:

Mãe, as palavras são insuficientes para agradecer a grande pessoa que você é na minha vida... Mas mesmo assim, obrigada pelo amor incondicional e a confiança na minha capacidade, que serviu de combustível a minha jornada.

Carlos, meu companheiro, meu amigo, meu confidente, meu marido... obrigada por me aguentar, por me amar... você deu o suporte emocional quando eu mais precisava; você estava em todos os momentos do meu lado; você acreditou em mim quando eu estava desacreditada; você cuida e cuidou de mim e eu vou ser apaixonadamente agradecida pra sempre.

Obrigada Karina, minha amiga-Irmã, mas também mãe acadêmica, no sentido de que você me colocou nesse mundo, me fez engatinhar, andar e falar e, por fim, me deixou com um ferramentário para aprender mais, amadurecer e conseguir fazer esse trabalho.

Obrigada meu parceiro Evandro, pelas horas a fio no gtalk®, na USP, na vida.

Obrigada a todos os meus amigos, especialmente a Dri, Má, Paulo, Davi, Camilinha, Cá, Tathi, Tati, Oz, Nati, Zé, Débora, Maria Clara, Jana, Mari, Carlinha, Bruna, Murilo, Camilona que me ouviram e me ajudaram a caminhar no decorrer desse processo, até o fim dessa etapa.

Agradeço às contribuições e risadas do GHQ; as ajudas da secretaria da pós; as críticas da banca de qualificação; e aos doutorandos que participaram desta pesquisa.

Agradeço ao Prof. Dr. Osvaldo, por sua atenção a minhas perguntas e reuniões sobre o meu projeto.

Agradeço ao CNPq pelo suporte da bolsa e à CPGI pelo financiamento a congressos.

Enfim, obrigada a todas as pessoas que contribuíram para essa etapa e para meu desenvolvimento como pessoa. Tenho consciência que eu sou o resultado da confiança e da força de todos que passaram pela minha vida.

"Que importância pode ter isso para nós? Nós que temos a resolver um problema muito mais prioritário e urgente, o da miséria e da fome?" Acenei, então, com uma sugestão de resposta - "há duas espécies de fome: a da miséria do corpo, esta, mais fundamental e determinante, visto que interceptadora de quaisquer outras funções, necessidades e realizações humanas; mas há também a carência de conhecimento, este, outro tipo de fome. Nossa luta tem de ser travada sempre simultaneamente em ambas as direções. (...) Por que haveremos nós de cruzar os braços, ficando à espera dos restos de sopa científica que os outros poderão, porventura, nos deixar de sobra?".

(Lúcia Santaella, 1983.)

Resumo

Lemes, A.F.G. **Aspectos filosóficos e educacionais da química**: investigando as concepções de doutorandos em química. 2013.179f. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Química, Instituto de Física, Instituto de Biociências, Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

Este trabalho investigou concepções de dez estudantes de doutorado em química de uma Universidade pública paulista, sobre aspectos da filosofia da química. Buscou-se compreender como a química se caracteriza para esse grupo de pesquisadores, a fim de obter subsídios a respeito de como essa ciência pode ser mais bem ensinada e aprendida. Utilizou-se, como referencial teórico, trabalhos das áreas de filosofia da química e ensino de química, abordando as peculiaridades dessa ciência, para analisar o conjunto de transcrições de dois grupos de entrevistas semi-estruturadas realizadas com os doutorandos. A análise dos dados obtidos levou à classificação das concepções dos doutorandos em duas categorias e nove subcategorias. A categoria “características da área de atuação da química” foi subdividida em “presença profissional no setor produtivo”, “aplicação prática”, “desenvolvimento de novas formas de explicação”, e “interfaces com outras ciências”. A segunda categoria, “características do pensamento químico”, abrangeu as subcategorias “realismo químico com referência a imagens”, “realismo químico sem referência a imagens”, “valorização das evidências experimentais”, “caráter qualitativo e relacional entre as entidades químicas”, e “utilização de múltiplos modelos”. Os resultados revelam, entre as características marcantes da química, a valorização da experimentação e sua relação com abordagens realistas para as entidades submicroscópicas. Foi possível observar, também, indicadores de distinção entre a produção de conhecimento em química e o ensinar química, sugerindo a necessidade de explicitar questões filosóficas para promover melhor formação de professores de química.

Palavras-chave: filosofia da química, ensino de química, doutorandos em química

Abstract

Lemes, A.F.G. **Philosophical and educational aspects of chemistry:** a study of chemistry graduate students' conceptions. 2013.179f. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Química, Instituto de Física, Instituto de Biociências, Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

This study investigated ideas of ten chemistry doctoral students from a public University in São Paulo about aspects of the philosophy of chemistry. Our aim was to gain insight on what chemistry is about for this group of researchers, in order to devise ways in which chemistry could be better taught and learned. Works in the areas of philosophy of chemistry and chemistry education were used to build a theoretical framework, addressing the peculiarities of this science. The set of transcripts of two groups of semi-structured interviews with the graduate students was analyzed using such framework. Data analysis led to the classification of the conceptions of the graduate students in two categories and nine subcategories. The category “characteristics of the range of chemistry” was subdivided into “professional presence in the productive sector”, “practical application”, “development of new forms of explanation”, and “interfaces with other sciences”. The second category, “characteristics of chemical thinking”, covered the subcategories “chemical realism with reference to images”, “chemical realism without reference to images”, “significance of experimental evidence”, “qualitative and relational character of chemical entities”, and “use of multiple models”. Results show the centrality of laboratory experiments and its relation to realistic approaches for submicroscopic entities among the outstanding characteristics of chemistry. Indicators of distinction between the production of chemical knowledge and the teaching of chemistry were also observed, suggesting the need for explicit philosophical discussions to improve chemistry teacher education.

Keywords: philosophy of chemistry, chemical education, graduate students

Sumário

Introdução.....	10
Capítulo 1 - Edificando um referencial teórico	12
1.1. Filosofia da química	12
1.1.1. Discussões sobre o corpo teórico e metodológico da química	12
1.1.2. Reflexões sobre o realismo na química	17
1.1.3. Redução da química à física.....	22
1.1.4. Questões sobre estética, ética e imagem pública da química	26
1.1.4.1. Estética: o que a ciência química tem de especial para chamar a atenção da sociedade e da comunidade química.....	27
1.1.4.2. Imagem pública: como a química é vista pela sociedade, e porque a comunidade científica ajuda a criar essa impressão	28
1.1.4.3. Ética: ou a falta de reflexão sobre ela.....	29
1.1.5. O que é a química? Há um consenso a esse respeito na área de filosofia da química?.....	30
1.2. A filosofia da química e a educação em química:	32
Capítulo 2 – Objetivos e Construção Metodológica	43
2.1 Objetivos	43
2.2. Construção Metodológica.....	45
2.2.1. Instrumento para coleta de dados	45
2.2.2. Sistematização dos dados: a organização para a análise	49
Capítulo 3 - Características da química segundo os doutorandos: discussão de aspectos filosóficos e educacionais.....	56
3.1. Categorias	56
3.1.1. Características da área de atuação da química	57
3.1.1.a. Presença profissional no setor produtivo	57
3.1.1.b. Aplicação prática.....	60

3.1.1.c. Desenvolvimento de novas formas de explicação	62
3.1.1.d. Interfaces com outras ciências	65
3.1.2. Características do pensamento químico	71
3.1.2.a. Realismo químico com referência a imagens	71
3.1.2.b. Realismo químico sem referência a imagens	81
3.1.2.c. Valorização das evidências experimentais	84
3.1.2.d. Caráter qualitativo e relacional entre suas entidades	90
3.1.2.e. Utilização de múltiplos modelos	96
Considerações finais	106
Referências bibliográficas	110
Apêndice 1 – Instrumento para coleta de dados do primeiro e segundo grupo de entrevistas.....	121
Apêndice 2 – Trechos das falas dos doutorandos distribuídos nas categorias e subcategorias	141

Introdução

Química é um assunto difícil de ensinar porque tem muitos conceitos abstratos que são totalmente desconhecidos para os alunos, cujas representações construídas estão, muitas vezes, em conflito com as explicações aceitas cientificamente (Treagust & Chittleborough 2001, p. 240, tradução minha).

Mesmo sendo um assunto difícil de ensinar, como apontam Treagust e Chittleborough, acredita-se que é importante ensinar química, pois sendo uma ciência da Natureza, contribui para a alfabetização científica necessária para o cidadão crítico e ativo (Santos & Schnetzler, 1996). O ensino de química pode ser beneficiado por reflexões a respeito de como o conhecimento químico se constitui e como se manifesta nas atividades dos profissionais que dele fazem uso. A filosofia da química é uma das áreas do conhecimento que busca esse entendimento e, assim, pode ser um referencial para entender como é possível aperfeiçoar o processo de ensino-aprendizagem da química. Considerando a passagem de Treagust e Chittleborough em epígrafe, destaca-se a importância das reflexões sobre como funcionam os conceitos abstratos e explicações na química. Sendo a filosofia da química um campo de investigações relativamente novo, existe ainda a necessidade de muitas investigações sobre as ideias estruturantes dessa ciência, para subsidiar mais discussões acerca de seu ensino, sendo um dos fatores que motivam o presente trabalho.

Nessa perspectiva, ideias estruturantes de um grupo de doutorandos em química foram levantadas para contribuir na definição do que organiza o pensamento dessa ciência e, assim, contribuir com direcionamentos que intentam ajudar de maneira mais profícua o ensino de química.

O presente trabalho se baseou em entrevistas com doutorandos em química da Universidade de São Paulo – USP, *campus* Capital. A escolha por doutorandos em química foi pelo fato de se tratar de pessoas envolvidas diretamente na geração de conhecimentos químicos e, nesse sentido, seu olhar é privilegiado a respeito das peculiaridades da química.

Assim, foi possível levantar alguns questionamentos sobre como a química funciona e implicações para o ensino dessa ciência.

Para o desenvolvimento do trabalho foram construídas categorias, a partir dos referenciais teóricos da filosofia da química e do ensino de química, e dos dados obtidos nas entrevistas. As categorias também trazem contribuições que ressaltam elementos de como a química funciona para os entrevistados, que são produtores de conhecimento químico. Sendo assim, para entendermos tais categorias, o trabalho apresenta, inicialmente, um levantamento teórico sobre as áreas de filosofia da química e ensino de química (Capítulo 1). Em seguida, explicita-se de que maneira o trabalho tentou contribuir com a área (Capítulo 2), onde também se explicitam os objetivos da pesquisa e a metodologia da pesquisa. Finalmente, apresenta-se a discussão das categorias construídas (Capítulo 3) e as reflexões finais sobre o trabalho realizado ao final do texto.

Capítulo 1 - Edificando um referencial teórico

1.1. Filosofia da química

A partir do levantamento bibliográfico que se segue, foi possível delinear quais as principais questões a respeito da natureza da química que estão sendo abordadas pelos filósofos da química na atualidade. Para isso, estruturamos esse tópico em quatro grandes eixos, que construímos a partir da leitura dos artigos da área: Discussões sobre o corpo teórico e metodológico da química; Reflexões sobre o realismo na química; Redução da química à física; e Questões sobre estética, ética e imagem pública da química. Dessa forma, procuramos sistematizar algumas discussões atuais da filosofia da química no sentido de melhor compreender o funcionamento dessa ciência.

1.1.1. Discussões sobre o corpo teórico e metodológico da química

Os trabalhos da área de filosofia da química analisados apresentaram diversas características da teoria e metodologia da química, além de colocarem em discussão como o corpo de conhecimento dessa ciência é construído. De modo geral, os artigos agrupados neste eixo problematizam a relação teorias-evidências experimentais, enfatizando o aspecto dual da química, que opera com a livre transição entre os fenômenos macroscópicos e as entidades teórico-conceituais (ou submicroscópicas).

Bernal & Daza (2010), Stein (2004), Laszlo (1999) e Schummer (1997a) sustentam que o corpo teórico da química é relacional e emerge dos dados experimentais. Bernal e Daza argumentam que, por exemplo, para designar o que é um ácido, é necessária a comparação de uma substância com outra. Stein acrescenta que, dependendo do ambiente químico em que a molécula se encontra (condições operacionais, tais como temperatura, solvente, etc.), haverá variação na estrutura molecular e assim, variação na propriedade da substância. Laszlo denomina as relações do tipo que existe entre ácidos e bases de “conceitos circulares” na teoria química. As operações experimentais reais dão ênfase aos conceitos criados pelo pensamento químico, relacionando os reagentes químicos em

contextos variados. Assim, Laszlo defende que os químicos têm a tendência de mesclar o que é percebido empiricamente com o que está postulado por sua mente. Laszlo ressalta, então, que essa circularidade, que se baseia em interações entre operações experimentais e teóricas, destaca a química das outras ciências. No entanto, essa particularidade também exige maior amadurecimento por parte de quem está estudando esta ciência. Tal conhecimento, baseado nesse relativismo, torna a química mais complexa do que outras ciências mais dedutivas (exemplo: astronomia, anatomia, etc.). Schummer também discorre sobre o caráter relacional da química, defendendo que essa ciência utiliza métodos experimentais para definir suas classificações. Sendo assim, Schummer advoga que as propriedades dos materiais da química são classificadas pelas condições experimentais (fatores contextuais), e não pelo comportamento do objeto, como na física¹. Desse modo, há teorias da química que não pode ser falseada (no sentido popperiano), pois ela não é regida por universais e sim por um dinamismo (ou seja, a propriedade muda dependendo com o que se compara), havendo a possibilidade de refinamentos e suplementações na teoria.

Diante dessa discussão sobre o corpo teórico da química, surgem os argumentos embasados no pragmatismo químico. Vemulapalli (2008) e Berson (2008) argumentam que os químicos escolhem as teorias mais convenientes para cada situação. Vemulapalli examina a utilização e importância dada, pelos químicos, às teorias de ligação de valência e de orbitais moleculares. Ele observa que, mesmo sendo teorias contemporâneas, a teoria de valência foi a preferida pelos químicos, e a teoria de orbitais moleculares foi quase ignorada. Segundo Vemulapalli, uma possível explicação para essa preferência seria que a teoria de valência – que proporcionava aos químicos uma visão rápida das propriedades, porém mais localizada em partes de uma molécula – era suficiente para explicar os fenômenos estudados naquela época. Berson (2008) examina casos históricos (teoria quântica de Bohr para o espectro atômico; o princípio de exclusão de Pauli; a teoria que correlaciona a

¹ Salientamos aqui que, dentro da física, há diferentes perspectivas filosóficas, sendo entendidas as referências à “física” ou aos “físicos”, neste trabalho, como aquelas que adotam a perspectiva instrumentalista, predominante nos cursos de física.

velocidade de reações com o equilíbrio químico; e a hipótese de Kekulé sobre as ligações oscilantes do benzeno) para argumentar que os químicos não dão muita atenção para as fragilidades das teorias, desde que elas sejam úteis. Assim, quando surgem fatos empíricos não previstos, os químicos somente fazem uma correção às teorias de forma *ad hoc*, em vez de abandoná-las, diferentemente do que recomendam alguns filósofos da ciência.

Deve-se observar, todavia, que esse pragmatismo está relacionado aos papéis da experimentação e das teorias na química, e não a uma imaturidade ou inferioridade dessa ciência. Schummer (2004), examinando 300 artigos de pesquisa em química, conclui que a atividade experimental dos químicos, diferentemente da dos físicos, de modo geral não tem como objetivo o teste de teorias. A experimentação, para os químicos, está voltada para a síntese e análise químicas, e as teorias servem como ferramentas para a pesquisa experimental. Kovac (2002) defende que o raciocínio prático dos químicos os faz considerar eventualidades na situação explorada, enquanto o raciocínio somente teórico focaliza universalidades. Desse modo, na química, o foco está na experimentação. Em virtude disso, quanto maior a experiência do químico em atividades práticas, maior sua intuição prática e maior sua desenvoltura em analisar sistemas não ideais (sistemas não teóricos).

Em 2003, Knight, investigando as imagens em livros didáticos de química, constatou que a química tem como eixo central a experimentação. Ao longo do tempo, o autor encontrou, nos livros, imagens com ilustrações de aparatos acrescidas de indicações visuais de evidências experimentais. Avançando mais no tempo, além da representação de como os experimentos eram feitos, foram adicionadas representações de modelos teóricos às ilustrações. Com isso, as imagens reforçam o caráter dinâmico da química, ou seja, a transição entre a evidência experimental e a teoria. Weininger (1998) faz um levantamento histórico sobre os “signos químicos”, e observa que os signos diminuíram em seu caráter linguístico (nomes) e aumentaram em seu caráter icônico (fórmulas e estruturas moleculares) ao longo do tempo. Lefèvre (2012) compreende que a prática química está relacionada à complexidade da preparação dos procedimentos requeridos para obter seus

objetos de pesquisa. Esse autor coloca em evidência que a experimentação na química não serve somente para isolar e identificar objetos, mas também produzir seus objetos. Sendo assim, a química não consegue estudar seus objetos sem produzir novos objetos.

Schummer discute com mais detalhes a questão da produção de novos objetos, em dois artigos (1997b e 1997c). Nesses dois trabalhos são apresentados os dados sobre o número crescente de substâncias químicas conhecidas entre os anos 1800 a 1995, coletados a partir de manuais, artigos de pesquisa em química e patentes. Sua análise apontou para a característica acumulativa da ciência química, pois a sua maior atividade é produzir novas substâncias e não avaliar teorias. Desta maneira, a produção de novas substâncias contribui para o desenvolvimento dos procedimentos e manipulações experimentais. Isso requer a produção de mais substâncias, guiada pela melhoria nas habilidades de preparação (aprimoramento de instrumentos; métodos experimentais e teóricos). Há também uma grande valorização da aplicação em um sentido mais amplo: novas substâncias trazem novas expectativas sobre a sua utilidade em várias tecnologias, ou sobre suas propriedades físicas e/ou biológicas. Em outro trabalho, Schummer (2010) sugere que a metodologia plural da química (cada área da química adapta suas metodologias, o que permite lidar com a complexidade de abordagens de acordo com o que importa em cada caso estudado) resulta na construção do conhecimento químico de maneira análoga à produção de uma “colcha de retalhos” (p.163). Isso significa que a química tem a tendência a se desenvolver pela incorporação de novos conhecimentos, sem entrar em crises² de teorias, aumentando sempre a “colcha”. Portanto, a química não está em sintonia com a ideia da filosofia da ciência tradicional, de que a ciência busca se completar e se aperfeiçoar para obter o conhecimento universal.

Uma ideia semelhante é desenvolvida por Baird (2002), quando analisa a revolução da química analítica, ocorrida entre as décadas de 1920 e 1950, e que não ocorreu na teoria, mas na prática e na profissão do químico. Houve mudanças nos limites do que é

² No sentido usado por Thomas Kuhn (1998), em *A estrutura das revoluções científicas*.

possível analisar; desenvolvimento de novos instrumentos; desenvolvimento de um novo modo em disseminar informações sobre instrumentos científicos. Adicionou-se, então, um novo tipo de conhecimento científico à química: a instrumentação científica. Diferente da revolução discutida por Kuhn (1998), nesta revolução em uma sub-área da química, a instrumentação surge como um veículo para conduzir o conhecimento. Sendo assim, os métodos instrumentais se tornaram a espinha dorsal da caracterização e separação das substâncias químicas, mas também levou ao encarecimento da atividade química. Outro trabalho relevante, sobre a revolução da química analítica, é o de Schummer (2002), o qual argumenta que o impacto da instrumentação na química repercutiu em nível ontológico³. Isso quer dizer que o maior peso dos resultados instrumentais influenciou no entendimento do que é a estrutura molecular, que passou a ser propriedade de uma substância química. Porém, substâncias são ontologicamente anteriores às propriedades: não há propriedades sem substância. Com isso, as estruturas moleculares são agora espécies cuja identidade deve ser determinada, estando sujeitas a classificação química.

Tontini (2004) observa que, a partir da compreensão de como se determinam as propriedades das estruturas (por meio de transformações de substâncias), a química desenvolveu, ao longo da história, uma linguagem teórica específica, para mediar a realidade empírica e a inteligência humana. Com o aumento no número de substâncias produzidas em laboratório, os químicos refinaram o corpo teórico e aumentaram o caráter real das suas representações, adicionando dinamicidade (movimento) a fórmulas estruturais e formalizando mecanismos de reação. Porém, Ramsey (1997) observa que, em situações diversas, os químicos utilizam diferentes fórmulas estruturais, que são representações diferentes para a mesma propriedade, dependendo da conveniência. Isso sugere que

³ Ontologia remete à discussão sobre a natureza do mundo ou o que existe (Pessoa, 2009). Sendo assim, a ontologia química está ligada a discussões das entidades e teorias químicas: por exemplo, se átomos e moléculas têm somente natureza teórica/explicativa, sendo apenas ferramentas conceituais para nós; ou se átomos e moléculas existem, independente do nosso pouco acesso a essas entidades.

existem modos de visualizar que são independentes da medição, e que podem ser alterados à vontade. Não é o caso de coexistirem teorias incompatíveis, e sim a questão da aproximação das teorias e modelos na química. É interessante notar que essa característica não tem valor pejorativo. Segundo Weisberg (2002), a química dispõe de modelos qualitativos para embasar suas explicações. Os modelos qualitativos sobre a estrutura molecular não são precisos: sua simplicidade, porém, aumenta o poder explicativo dos modelos (permite maior generalização). Se os modelos não fornecem muita precisão a geometria molecular, podem explicar por que as moléculas assumem determinada forma.

Em suma, os trabalhos enfatizam que a química, atualmente, tem um caráter particularmente visual na manifestação de suas teorias. Essa valorização das representações pictóricas da teoria, juntamente com a mudança das características dos laboratórios e as evidências produzidas a partir destes, fez aflorar um caráter de realidade para as entidades submicroscópicas da química, o qual será discutido na próxima sessão.

1.1.2. Reflexões sobre o realismo na química

Como vimos na sessão anterior, a natureza teórico-prática da química tangencia a questão do realismo das entidades químicas, pois as evidências corroboram as estruturas teóricas propostas. Grande parte dos trabalhos sobre esse assunto traz argumentos baseados no crescente desenvolvimento de novos materiais e no surgimento de novas tecnologias para medição e simulação. Como se verá adiante, a síntese e os equipamentos influenciam no modo como os resultados e teorias da química são entendidos.

Del Re (2000 e 1998) discute o aumento do nível de acesso ao objeto de química, por meio de equipamentos de medição (constituindo no nível de acesso direto estendido). Com o desenvolvimento dos equipamentos, houve o aumento na confiança acerca do que é observado, ainda que essas observações estejam baseadas em inferências ou analogias. Os modelos partem do pensamento analógico para tentar representar os sistemas ou coisas do mundo. Para Del Re, as analogias têm algumas propriedades equivalentes ao real,

sendo, assim, verdades limitadas. Portanto, se o modelo estrutural abrange algumas propriedades das moléculas reais, os modelos são expressões da realidade. Além do mais, a maioria dos experimentos dão resultados que concordam com a suposição de que as moléculas têm estruturas correspondentes a esses modelos. Com isso, não é a matemática da mecânica quântica que exprime o que existe e o que não existe no mundo das entidades não diretamente visíveis. De fato, acredita-se que essas entidades existem, como decorrência de evidências analógicas e lógicas oriundas das observações experimentais. Tontini (1999) acrescenta que as anomalias e imprevistos experimentais levam ao refinamento, ainda maior, do conhecimento sobre a realidade molecular. Além disso, para a elucidação de estruturas moleculares, as substâncias investigadas são submetidas a diferentes métodos analíticos (técnicas baseadas em diferentes princípios, tais como RMN, infravermelho e espectrometria de massas). Com a obtenção de resultados convergentes, a ideia da existência real da estrutura molecular é, então, reforçada.

Investigando o papel dos modelos na pesquisa química em laboratório, Francoeur (2000) segue perspectiva semelhante, acrescentando que os modelos são úteis, pois materializam (tornam concretos) os sinais oriundos da instrumentação. No entanto, Francoeur ressalta que os modelos não são simplesmente observados no laboratório. Muitas vezes, eles são submetidos a várias manipulações de medição e de exame, para que possam ser mais trabalhados e elaborados no processo de investigação, sendo, assim, de uma materialidade não definitiva.

Laszlo (1998 e 2000) entende o surgimento e utilização de novos aparatos de medição como uma tendência à desmaterialização do conhecimento químico. O autor defende que os instrumentos aumentaram a sensibilidade de medição, mas se distanciam da realidade, ao substituírem as percepções imediatas (cor, textura, volatilidade, etc.) por entes microscópicos idealizados. Com isso, Laszlo afirma que a única realidade é o espectro, que é uma linguagem associada a um significado, ou seja:

Na análise espectral não estamos lidando com um acoplamento arbitrário entre o signo e o que está sendo representado. Ao contrário, existe uma base intrínseca para tal associação, ambos empíricos e necessários: um pico dado, a uma certa frequência e de uma certa forma, no espectro de RMN de etanol, significa metila, não porque eu quero que seja assim, mas porque é realmente assim. O único aspecto arbitrário, aqui, é denominação do termo "metila" para este grupo de átomos, CH₃ (Laszlo, 1998, p. 5).

O modelo molecular tem semelhança com uma realidade postulada, misturando convenções com fatos e, deste modo, tem um grande papel operacional. Assim sendo, o laboratório na química é entendido por Laszlo como sendo o lugar onde, além de se produzir novas substâncias, são produzidos, principalmente, novos conceitos. Em artigo de 2002, Laszlo menciona que os instrumentos influenciam o realismo ingênuo que repercute, além da desmaterialização, também a destemporalização: considerando as estruturas moleculares como um objeto estático e rígido, apaga-se a dimensão do tempo. Sendo assim, a estrutura de uma molécula fica em um período de tempo alheio às evidências instrumentais e experimentais.

Tomasi (1999) argumenta que, com o entendimento da estrutura molecular acompanhado de evidências experimentais, a química transformou, ao longo dos anos, seus modelos simbólicos (não matemáticos e abstratos) em modelos com estatuto icônico. Assim, há um movimento que parte de modelos e se acredita aproximar, gradualmente, dos objetos reais. Segundo Tomasi, uma estrutura do tipo bola-e-vareta não pode ser considerada como um modelo de um modelo, mas um modelo icônico de um referente real. Grosholz & Hoffmann (2000) acrescentam que a linguagem icônica dos químicos emprega convenções compreensíveis do objeto e associações com a linguagem simbólica. A linguagem mais simbólica da química capta a composição das moléculas, mas não a sua estrutura (constituição, configuração e conformação), aspectos que são tratados melhor pela linguagem mais icônica. Sendo assim, a forma icônica faz uma ponte entre o macroscópico e o submicroscópico, tornando o invisível, visível. Em outro trabalho, Hoffmann (2007)

acrescenta que a manipulação das transformações químicas ajuda a reforçar esse realismo do químico. Segundo Hoffmann, é difícil não acreditar que a estrutura de um composto é mesmo de uma determinada forma se, a partir daquela estrutura e propriedades conhecidas, se consegue prever a formação de outra substância e, logo após, se consegue sintetizar essa nova substância e ter evidências experimentais de que a estrutura prevista foi alcançada.

Burewicz & Miranowicz (2003) defendem que a multidimensionalidade é uma característica das representações na química, a qual facilita a análise e a síntese. Tipicamente, os pesquisadores em química coletam parâmetros de reações, e o tratamento desses dados resulta em espectrogramas, gráficos, estruturas e modelos. Esses parâmetros são incorporados nas representações, com várias dimensões para a visualização: as equações químicas e fórmulas moleculares são representadas em uma dimensão física; os esquemas de mecanismos de reações utilizam duas dimensões; estruturas geométricas são representados em três dimensões; e mecanismos que consideram parâmetros estéricos são representados em quatro dimensões (três dimensões espaciais e uma no tempo, dando uma descrição dinâmica). Com isso, quando o químico consegue visualizar um objeto, ele frequentemente o considera como o objeto real.

Também nessa perspectiva de símbolos/linguagem e evidências experimentais, Jacob (2001) enfatiza que o simbolismo químico fornece uma representação linguística para a pesquisa experimental química. No entanto, a linguagem química promove, mas também limita, o desenvolvimento experimental. Em outras palavras, o potencial da linguagem química ultrapassa o experimental, quando dispomos da sintaxe química para escrever a fórmula, descrever a estrutura e propor a nomenclatura de um composto que, *a priori*, não existe. Entretanto, em alguns casos, é a potencialidade experimental que excede a capacidade da linguagem, se porventura surgir uma evidência experimental que não é prevista pela linguagem química (exemplo disso foi a controvérsia surgida por ocasião da preparação do fulereno, C₆₀). Em virtude disso, Jacob conclui que os químicos devem estar

mais conscientes dos limites da linguagem e da experimentação, e refletir sobre qual o papel da operação sobre compostos ou sobre a linguagem.

Mainzer (1999) defende a perspectiva realista na química, argumentando que os modelos computacionais e a realidade virtual ampliam a imaginação dos químicos. Os programas de computador abrem caminhos para outras pesquisas experimentais, com menor gasto de tempo e dinheiro. Mas Mainzer ressalta que as simulações não competem com a atividade experimental tradicional e obrigatória. Trindle (1999) acrescenta que a modelagem computacional também persuade os químicos, e com essa aceitação aumenta-se a intuição deles.

Zeidler (2000) reconhece que, sem a prática experimental, a pesquisa teórica não conseguiria construir os modelos teóricos. Zeidler defende um antirrealismo moderado, em defesa da dinamicidade dos modelos. De acordo com Zeidler, para o mesmo objeto ou sistema, há vários modelos com possibilidades de representá-lo, pois isso depende do problema investigado. Isso porque os dados sobre o sistema, como resultado de medições, dependem da teoria e dos procedimentos de medida. Como consequência, a similaridade entre o modelo e o sistema real não pode ser determinada, pois cada método experimental interage de forma diferente com entidades submicroscópicas, fazendo emergir a necessidade de modelos diferentes. Zeidler enfatiza que a mesma propriedade pode ser representada diferentemente, adequando-se às circunstâncias – portanto, não há um único modelo. No entanto, Zeidler está ciente de que é comum, entre os químicos, aceitar a interpretação realista, porque o modelo dinâmico supõe idealizações, e não serve heurísticamente, nem explicativamente, nem preditivamente em química experimental; e tampouco serve educacionalmente, pois não tem uma representação concreta.

Para tentar explicar a preferência dos químicos pelo realismo, Good (1999) argumenta que um consenso em torno da existência dos átomos foi estabelecido entre os químicos, muito antes do que entre os físicos. Desde esse consenso, a química tem

empenhado seus pensamentos em termos de átomos. Good acrescenta que o desprezo dos químicos pela filosofia de ciência pode ser uma reação contra a concepção tradicional dessa disciplina, que não leva em consideração as particularidades da química. Vihalemm (2011) argumenta que o realismo dos químicos não é o ingênuo, e sim o prático. A prática científica acessa, via experimento – que manipula e interfere nos materiais da natureza – o mundo real, sendo guiado por uma teoria, e regido por normatizações. Nesse sentido, o que é "dado", via prática química, é um aspecto do mundo real.

1.1.3. Redução da química à física

Uma discussão, que reúne questões sobre as características da química e sobre o realismo, é a que trata da redução (ontológica ou epistemológica⁴) da química à física. A maior parte dos artigos citados nesta sessão faz referência ao submicroscópico, particularmente no que tange às entidades e à natureza dos fenômenos que, à primeira vista, parecem ser compartilhadas entre as duas ciências. No entanto, a maioria das opiniões se inclina em direção à não redução da química à física.

Na tentativa de resistir à redução fisicalista, Schummer (1998) estruturou o conhecimento químico como se fosse uma rede, e colocou, como núcleo central, as propriedades químicas – que são relacionais e determinam a lógica do conhecimento químico em todos os níveis educacionais. Essas propriedades são investigadas e sistematizadas por experimentos em diferentes contextos, artificiais ou naturais. Segundo Schummer, a representação molecular não é uma teoria, mas o resultado da teoria: esta fornece as regras para interpretar os dados e desenvolver representações moleculares. Na analogia com a rede, as classes de substâncias seriam como os nós, e as relações entre as classes seriam como conexões, sistematizando as propriedades químicas. Com essa rede

⁴ Redução ontológica se refere à dependência das entidades, propriedades e regularidades de um estrato da realidade, sobre as entidades, propriedades e regularidades de outro estrato ontologicamente mais fundamental; e redução epistemológica se refere à relação entre as teorias científicas: uma teoria é deduzida de (e reduzida a) outra teoria mais fundamental (Labarca & Lombardi, 2005). Sobre o reducionismo, do ponto de vista da filosofia da ciência, vide Nagel (1982).

de relações, a química, então, se diferenciaria da física, pois a física segue a abordagem de “objetos isolados”.

Mainzer (1997) também se baseia na ideia de isolamento de objetos na metodologia da física. Ele descreve que a mecânica quântica opera sobre átomos como peças separadas, enquanto a química opera considerando a maneira como os átomos estão organizados e relacionados uns com os outros. O arranjo dos átomos nas moléculas influencia suas propriedades, como no caso dos isômeros. Então, aspectos dinâmicos e complexos do sistema molecular, em reações químicas, não podem ser explicados olhando-se para cada átomo isoladamente.

Com a mesma preocupação de entender qual o papel das teorias quânticas na química, Caldin (2002) defende que teorias químicas são construções, e não deduzidas a partir das teorias físicas. As teorias químicas vão além de representar as leis que interpretam. É o caso da teoria atômica, ou da classificação de substâncias puras em elementos e compostos, por exemplo. Dessa forma, a maioria dos químicos está mais satisfeita com os modelos construídos, que podem ser desenhados no papel, ou manipulados com esferas e molas, do que com cálculos, feitos a partir de leis, que resultam em orbitais – embora eles saibam que a estrutura do benzeno, por exemplo, pode ser corretamente deduzida a partir das duas perspectivas.

Outros autores fazem referência às diferenças entre o conceito de orbital utilizado pelos físicos, e o conceito de orbital de que os químicos fazem uso. Mulder (2011) explora a ideia de que orbitais físicos não são observáveis porque são estados, e os orbitais em química são entendidos como densidades eletrônicas e, assim, são observáveis. Ogilvie (2011) argumenta a não existência intuitiva de funções de onda (orbitais), mas admite que se pode medir experimentalmente as propriedades dos átomos e moléculas. Nesse contexto, o argumento de Hendry (1999), que adota uma abordagem histórica, mostra que a espinha dorsal da teoria molecular (relacionada às propriedades das moléculas e átomos)

provém da química do século XIX, tendo sido postulada antes do advento da mecânica quântica.

Ramberg (2000), também se fundamenta na história da química para afirmar que a construção e utilização de modelos de representação é uma atividade central na formação da teoria química. Ramberg exemplifica seu ponto de vista expondo o caso da estereoquímica. Com uma linguagem simbólica para as propriedades tridimensionais dos arranjos de átomos, os químicos foram capazes de explicar o fenômeno da isomeria e postular mecanismos de reação. Com isso, os químicos passam a acreditar que os arranjos tridimensionais são as possíveis formas das moléculas, e não simplesmente um instrumento de previsão.

Labarca e Lombardi (2005) utilizam o argumento do “pluralismo ontológico”, que tem como base o realismo químico, para defender a não redução ontológica da química à física. Segundo os autores, não existe uma ontologia mais fundamental, e sim ontologias que são características de cada ciência. Com isso, o químico atribui um estatuto ontológico mais realista para os orbitais. Então, não há contradição na concepção de orbital como sendo entidade existente no nível ontológico químico, mesmo considerando que os orbitais não são entidades reais de acordo com a ontologia da mecânica quântica.

Scerri (2005), por sua vez, também sugere uma visão realista, tendo, porém, como foco, a tabela periódica, alinhando argumentos de natureza metafísica e ontológica para a não redução da química à física. Com uma exposição e análise, em uma abordagem metafísica, de várias definições de elemento, Scerri propõe que os grupos de elementos, bem como os elementos em si, são portadores de propriedades e, portanto, reais.

Em 1991, Scerri defendeu a não redução epistemológica da química, pois as teorias físicas baseiam suas previsões em modelos matemáticos, enquanto a química se baseia em classificações relacionadas a qualidades da matéria (por exemplo: cor, cheiro, textura, etc.). Além disso, os conceitos classificatórios da química são usados como meio de

representação das substâncias (por exemplo: ácido, elemento, etc.). No entanto, essa classificação, diferentemente da classificação dos organismos da biologia, ajuda os químicos na investigação e classificação de substâncias novas.

Schummer (2003a) examina controvérsias históricas do século 19 (a natureza da fermentação; a natureza de doenças infecciosas; geração espontânea de matéria inanimada; vitalismo) para defender que a interdisciplinaridade está disfarçada pela perspectiva reducionista dos filósofos da ciência. No artigo, o autor conclui que três controvérsias (fermentação, doenças infecciosas, geração da vida) eram interdisciplinares no sentido de que pesquisadores de diferentes disciplinas estiveram envolvidos e, independentemente da sua origem disciplinar, utilizaram e aceitaram métodos experimentais de origens disciplinares diferentes como elementos válidos cientificamente.

Em outro artigo, Schummer (1997d) também defende o não reducionismo da química à física, mas agora examinando a subdisciplina físico-química. Ele argumenta que essa subdisciplina não integra a química com a física: somente relaciona algumas teorias das duas ciências, criando um híbrido. Para sustentar esse argumento, Schummer esclarece que a físico-química tenta explicar a diversidade dos materiais em termos quantitativos (uma característica tipicamente física), mas usa o pluralismo pragmático de modelos (característica química); utiliza instrumentos e técnicas físicas para buscar as peculiaridades dos materiais e não propriedades universais, pois não está preocupada com leis, teorias ou modelos universais. Então, a físico-química, com seu pluralismo pragmático de modelos, submete os modelos ao aperfeiçoamento e à adaptação, e a testes cruciais (físicos), levando ao surgimento de novos modelos, que combinam conceitos de teorias físicas e químicas, criando uma interface entre as duas ciências.

Outro trabalho sobre o reducionismo é o de Cerruti (1998), que articula a distinção ontológica, analisando a prática experimental de químicos e físicos. Cerruti confronta essas práticas por meio de um exemplo: tendo uma amostra de sacarose, o químico pode dar uma

colher dessa substância e algumas regras de uso adequado (por exemplo, utilizar em alimentos ou em uma fermentação) para um colega. Com isso, amostras de substâncias podem ser transferidas de um laboratório para outro. No entanto, físicos de alta energia (os que trabalham com partículas de alta energia e núcleos de átomos), trabalham, por exemplo, com decaimentos do méson J/psi, e assim, não conseguem dar uma “colher” (p. 14) desse fenômeno para outro laboratório. Com isso, Cerruti conclui que a diferença da química para a física é que a física tem o objetivo de criar fenômenos, enquanto a química tem como objetivo produzir substâncias. Na química, os reagentes são os principais instrumentos de separação e purificação, para operar no nível macroscópico. Mas, para completar tal operação, os químicos necessitam do auxílio de solventes, que criam, ou modificam, as condições experimentais; e de indicadores, que permitem fazer medições.

No entanto, Scerri (2007a) entende que existe a redução epistemológica da química à física, reconhecendo a contribuição quantitativa da química quântica para o corpo de conhecimentos da química. Mas Scerri argumenta contra a redução ontológica em uma perspectiva emergentista, que considera a existência da singularidade em conjuntos complexos, impossibilitando que suas propriedades sejam deduzidas do conhecimento de suas partes. Com isso, a física não dá conta das propriedades manifestas das substâncias. Exemplificando essas propriedades manifestas com um excerto do texto de Scerri:

os átomos de hélio, com dois prótons e dois elétrons, são totalmente não-reativos, enquanto a adição de apenas um próton e um elétron produz átomos de lítio, um elemento que forma uma multiplicidade de compostos, e que reage com água para formar uma solução alcalina (Scerri, 2007a, p. 78).

1.1.4. Questões sobre estética, ética e imagem pública da química

Em questões relacionadas a características dos químicos e sua relação com a ciência e a sociedade, a comunidade de cientistas químicos pode não estar refletindo sobre os aspectos éticos, sociais, estéticos e ambientais que o conhecimento químico implica. Por

isso, enfatiza-se que essas questões precisam de maior consideração por parte dos químicos.

1.1.4.1. Estética: o que a ciência química tem de especial para chamar a atenção da sociedade e da comunidade química

Schummer (2003b) investigou sistematicamente o potencial estético dos produtos químicos, que caracterizou em materiais, moléculas, e modelos moleculares. Schummer argumenta que a química contribui para as formas estéticas com a produção de novos materiais (plásticos, corantes, cheiros e sabores, etc.). Mesmo não sendo visíveis diretamente, as moléculas também contribuem para a estética química. Como os químicos, frequentemente, não distinguem claramente as moléculas de suas representações, as reivindicações para a beleza das moléculas remetem à beleza dos modelos. Por isso, Schummer focalizou a caracterização estética nos modelos, utilizando o termo “modelo molecular” para denotar objetos perceptíveis que são produzidos para representar ou para ilustrar estruturas moleculares ou ideias (tais como: desenhos, modelos de bola-e-vareta, computação gráfica, etc.). A partir de uma perspectiva sugerida por trabalhos de Umberto Eco, Schummer explica que os modelos moleculares são esteticamente atraentes porque se assemelham a coisas da vida comum, o que facilita a pesquisa química. Com isso, o autor põe em evidência a existência de aspectos estéticos, tanto externos quanto internos, gerados pelos produtos químicos. No caso particular dos químicos, esses aspectos, como Root-Bernstein (2003) também sugere, motivam as escolhas de suas áreas de pesquisa, pois as formas, cores, cheiros e sabores motivam seus interesses, como a sociedade em geral se motiva.

Schummer & Spector (2007) e Laszlo (2003) desenvolveram seus argumentos sobre a estética química, baseados na dualidade dessa ciência. Schummer & Spector focalizaram as várias personalidades da química: ao mesmo tempo acadêmica e industrial, conceitual e aplicada. Para Laszlo existe o natural e artificial; invisível e visível; complexo e simples; imprevisível e lógico. Ele entende que a química tem sua estética marcada principalmente

por suas entidades invisíveis, propostas para dar conta de mudanças visíveis. Para isso, o químico utiliza uma linguagem icônica simples, para expressar conceitos complexos e explicar fenômenos ainda mais complexos. No entanto, Laszlo salienta que os químicos desenvolveram uma linguagem interna, e muito peculiar, o que dificulta a aprendizagem por parte dos alunos, especialmente daqueles que não irão se tornar futuros químicos.

1.1.4.2. Imagem pública: como a química é vista pela sociedade, e porque a comunidade científica ajuda a criar essa impressão

LaFollette (2006) investigou os valores manifestados nas publicações da agência de notícias *Science Service*. Essa organização procurou promover a discussão da ciência, através de artigos de jornais, livros e programas de rádio, de uma forma que fosse aceitável para os cientistas e ainda rentável para as editoras. O autor expõe que, durante os anos 1930, nos Estados Unidos, a química atraiu mais atenção, em virtude do interesse do consumidor nos novos produtos farmacêuticos, têxteis, fertilizantes e inseticidas. A comunidade científica teve uma aceitação pragmática em relação à mídia, talvez supondo que, com participação na comunicação, atrairia apoio econômico e político – considerando preferível que a química fosse vista como um mal necessário, em vez de um inimigo. Dessa forma, a mídia promoveu a popularização dessa ciência por meio da dramatização dos acontecimentos, apresentando cientistas como celebridades, e vinculando a química a uma imagem conectada aos bens de consumo.

Laszlo (2006) mostra que, entre 1950 e 2000, o contexto militar do pós-guerra influenciou várias mudanças na teoria e na prática química, o que refletiu também sobre sua imagem pública. Os químicos passaram de benfeitores da humanidade para praticamente os únicos a serem responsabilizados pela poluição ambiental. Acrescente-se ainda que a atividade dos químicos, neste período, também lidou com uma revolução nas ferramentas de laboratório e tópicos de interesse, mas, mesmo assim, a comunidade de químicos permaneceu em torno de uma linguagem comum: as fórmulas estruturais. Diante desse cenário, há que se ressaltar a adaptabilidade dos químicos, que, na opinião de Laszlo,

decorre de sua formação, pois são habituados a acompanhar e controlar transformações de materiais, e, portanto, controlar e acompanhar mudanças até no seu campo de atuação e na sua imagem.

Também preocupado com a imagem pública da química, Sjöström (2007) analisa o discurso da química. Sjöström ressalta que a química tem um discurso aproblemático, sem reflexão, e que os objetivos da pesquisa e da educação em química não estão claros. O discurso da química está baseado em objetivismo, positivismo, reducionismo molecular, e racionalismo, mas tais visões são adotadas sem reflexão a respeito. Com isso, Sjöström defende a integração de perspectivas filosóficas, históricas e sócio-culturais na pesquisa e na educação em química. Tais perspectivas poderiam proporcionar não só uma visão mais crítica e reflexiva aos profissionais da área, mas também a melhora na imagem pública da química. Atualmente, esta imagem está relacionada à neutralidade, à geração de progresso constante, de melhorias para a sociedade moderna e à valorização as entidades submicroscópicas em seu laboratório, em detrimento da vida real.

1.1.4.3. Ética: ou a falta de reflexão sobre ela

Schummer (2001) alerta sobre os problemas éticos relacionados à química, tais como pesquisas sobre armas químicas, poluição ambiental, acidentes químicos, "efeitos colaterais" negativos (e não intencionais) de produtos químicos, etc. Para exemplificar essa ideia, Jacob & Walters (2005) usam um estudo de caso sobre o agente laranja, e mostram como a síntese de novas substâncias químicas provoca uma série de problemas éticos e morais. Com isso, os autores almejam maior conscientização dos químicos em relação à síntese de novos compostos, pois estes trazem consigo uma carga de responsabilidade no tocante à segurança e ao monitoramento de sua propagação no ambiente.

Kovac (2001) ressalta outro problema ético relacionado à química, envolvendo a cooperação entre a indústria química e a química acadêmica. A química tem a singular ligação entre a pesquisa pura e aplicada, entre a indústria e a academia, sendo essa ligação

intelectual e economicamente benéfica para ambos os lados, sem tensões aparentes. Entretanto, essas relações geram questões importantes, especialmente no que se refere a influências do financiamento privado nas pesquisas feitas nas universidades. Essas questões envolvem a privatização do conhecimento, com a veiculação de artigos em bancos de dados comerciais, e a crescente pressão no sentido de patentear e comercializar os resultados das pesquisas.

Há muitas controvérsias envolvendo a química, mas os artigos sugerem uma aparente apatia da comunidade de químicos. Há necessidade de reflexões de natureza ética para compreender os valores científicos (tanto os valores internos, na forma de como o trabalho científico é realizado; quanto os valores externos, de como a ciência se relaciona com a sociedade em geral). Diante disso, Eriksen (2002) propõe que a formação dos químicos incorpore análises históricas, filosóficas e sociológicas sobre o empreendimento científico, discutindo também os valores que regem este empreendimento. Tal perspectiva propiciaria reflexões éticas que, incorporadas à educação, seriam levadas à prática dos químicos. Se levada a efeito, tal perspectiva poderia servir também para que a sociedade em geral refletisse mais sobre a química.

1.1.5. O que é a química? Há um consenso a esse respeito na área de filosofia da química?

Diante da revisão delineada acima, pode-se constatar que a questão filosófica sobre “como a química funciona” é discutida, por diferentes autores, por diversos modos de olhar e refletir sobre a química. Essas diversas tentativas de entender quais são as particularidades da química revelam um campo de conhecimento amplo, produtivo e complexo. Reforça-se aqui a ausência de consenso sobre se a química se centraliza na experimentação; se na manipulação de entidades teóricas ou de substâncias químicas; se os químicos devem ser realistas ou não; ou se a química é ou não redutível à física.

Percebe-se, ainda, uma preocupação crescente, entre os filósofos da química, de promover a inserção dessas discussões na comunidade química e em todos os níveis educacionais. Esses diferentes olhares devem ser divulgados e discutidos, para que haja maior reflexão por parte das pessoas que fazem, organizam, estudam e divulgam a química. Vale notar, ainda, que, embora haja diferentes perspectivas e conclusões, a área de filosofia da química está longe de se esgotar; ao contrário, encontra-se em expansão.

Diante do exposto acima, pode-se notar a complexidade envolvida na tarefa de compreender e delimitar o campo dessa ciência. Assim, ressalta-se a importância de maiores investigações no âmbito de como os químicos lidam com o conhecimento químico, na educação e no dia-a-dia de seus trabalhos e pesquisas, a fim de fornecer mais subsídios para essas reflexões. Sendo a filosofia da química uma área recente (Labarca, 2010), a interface entre a filosofia da química e a educação química é, por consequência, ainda mais recente e desafiadora, e será abordada na próxima subseção.

1.2. A filosofia da química e a educação em química: uma frutífera interface

O estudo da natureza da química, seus conceitos, modelos, teorias, etc., são compartilhados pela filosofia da química e pesquisas em educação química (Labarca, 2006, 2009). Em virtude disso, a interface filosofia e educação química pode se tornar uma relação frutífera e simbiótica, pois as análises sobre a ciência química, propostas pelos filósofos, abrem as possibilidades de: a partir do conhecimento dos objetivos da química, direcionar critérios de seleção de conteúdos para ensinar essa ciência (Schummer, 1999); através da investigação dos tipos de questões que orientam as pesquisas químicas, subsidiar a produção de guias para a organização do currículo de química (Talanquer & Pollard, 2010); proporcionar um entendimento mais profundo sobre a química, podendo ajudar os educadores a promoverem melhores explicações no ensino dessa ciência (Scerri, 2007b).

As pesquisas em filosofia e ensino de química defendem a reestruturação do ensino de química em todos os níveis, levando em consideração vários aspectos filosóficos. Para Justi e Gilbert (2002), Earley (2004), Goedhart (2007) e Erduran (2005), essa mudança deve ser iniciada na universidade, onde se formam os professores de ensino médio que perpetuam concepções para alunos, as quais chegam à população em geral. Justi e Gilbert (2002) investigaram o Conhecimento do Conteúdo (sigla CK em inglês) e o Conhecimento Pedagógico do Conteúdo⁵ (sigla PCK em inglês) sobre questões relacionadas à filosofia da química de trinta e nove professores do Brasil e Inglaterra. Nesse artigo, particularmente, os autores focaram na discussão e análise do estatuto epistemológico dos modelos e modelagem de nove professores universitários de química. Justi e Gilbert sugerem que o ensino superior de química é tradicional: o professor é um especialista que transmite modelos, não atenta para quais modelos os alunos utilizam, e nem propicia momentos de atividade de modelagem com os alunos. Esse tradicionalismo é transmitido ao ensino e aprendizagem nas escolas e, por conseguinte, para a população. O relato apresentado leva

⁵ PCK é a habilidade de comunicar CK para os estudantes (Shulman, 1987).

à compreensão do papel da universidade na propagação da imagem da química, por meio do seu ensino:

Químicos formados se tornam pesquisadores: a pesquisa filosoficamente instruída deveria ser mais perspicaz do que a pesquisa simplesmente empírica. Químicos formados se tornam professores: o ensino filosoficamente instruído deveria melhorar tanto a qualidade dos futuros químicos como a apreciação e a compreensão das ideias químicas pelo público em geral (Justi & Gilbert, 2002, p. 214, grifo meu).

Frente, também, a essa questão, Earley (2004) propõe a reestruturação da disciplina de química geral, dando ênfase à compreensão de aspectos sintéticos, de desenvolvimento e de evolução da natureza. Earley aponta que a disciplina de química geral aborda uma obsoleta natureza da química. Assim, em vez de a disciplina focar principalmente a análise de componentes microscópicos prontos, a química introdutória deveria enfatizar um sistema conceitual mais geral que tenta entender como o mundo funciona. Earley defende que esta abordagem daria uma boa preparação para o trabalho do futuro profissional, além de fazer uma conexão melhor com os interesses dos estudantes.

Goedhart (2007) defende que a síntese, a análise e o desenvolvimento de teorias são os princípios organizadores do trabalho químico, e por isso devem ser temas centrais para organizar um currículo de graduação em química. Defendendo a reformulação do currículo atual, Goedhart expõe a necessidade de uma estrutura “projetada para fazer com que o currículo de química corresponda às experiências de químicos reais que fazem a química real” (Goedhart, 2007, p. 972).

Com a mesma preocupação de modificar o ensino superior de química, Erduran (2005) apresenta o estudo da química da água permeado pela discussão reducionista, para o ensino médio e superior de química. Segundo a autora, a química da água envolve o exame minucioso da composição, estrutura molecular e ligação química, além da reflexão sobre as características microscópica, macroscópica e simbólica do estudo dessa substância. No entanto, a adesão a essa atividade implica na reestruturação,

principalmente, do ensino superior, onde é escassa a explicitação de controvérsias sobre a teoria química. Um exemplo apresentado por Erduran são os livros didáticos convencionais utilizados nesse nível, que, quando iniciam as explicações mecânico-quânticas, presumem que essas explicações não são controversas, não promovendo a compreensão mais profunda desse conceito.

Essas controvérsias mecânico-quânticas são debatidas, principalmente, nos trabalhos sobre o reducionismo, que discutem muitos aspectos importantes para a educação química (Scerri, 2000a). Tal discussão, se incorporada ao ensino, pode refletir sobre o entendimento de “como” e “o que” ensinar em química, principalmente no ensino superior, onde são formados profissionais capazes de produzir e modificar o conhecimento químico. Kaya e Erduran (2011) observam que a perspectiva reducionista no ensino de química exclui outras possibilidades, podendo dificultar o ensino e a aprendizagem da natureza do conhecimento químico, que é distinto do conhecimento da física. Sendo assim, eles enfatizam a necessidade de o ensino de química visar o encultramento da linguagem e dos níveis de representação da química. Além disso, defendem que a utilização do conceito de circularidade, proposto por Laszlo (1999), impede que o raciocínio dedutivo seja enfatizado, como ocorre, normalmente, no ensino da física.

Talanquer (2011a) também argumenta que a adoção da física como ciência paradigmática frequentemente conduz a química a um estatuto subalterno, ou seja, as teorias, modelos e modos de pensar da química seriam menos corretos e importantes que os da física. Assim, a suposição de que o conhecimento químico pode ser reduzido a leis e princípios da física reforçaria a convicção de que somente têm valor os modelos e teorias químicas que podem ser expressos em termos físico-matemáticos. Ou seja, a perspectiva reducionista impactaria no ensino de química, dando ênfase em quantificações, cálculos e aplicação de algoritmos, em detrimento de aspectos qualitativos, relacionais e classificatórios que são essenciais no conhecimento químico.

Erduran e Scerri (2002) sustentam que reflexões filosóficas sobre o reducionismo aprofundam o conhecimento sobre a natureza das explicações químicas e sobre como este

conhecimento é gerado e avaliado, o que possibilita a melhora na compreensão dos alunos sobre conceitos-chave da química. Nessa perspectiva, eles defendem que a questão da redução suscita várias questões sobre a estrutura do conhecimento químico. Para a promoção da incorporação de questões como a redução, Erduran e Scerri concluem que os professores de química precisam saber como o conhecimento disciplinar é estruturado e, portanto, estudar filosofia da química, para saber como melhor ensinar.

Para melhorar o entendimento da química, Erduran e colaboradores (2007) e Erduran (2001) enfatizam que se faz necessária a compreensão do processo de modelagem. Isso porque o raciocínio químico utiliza modelos, e estes são utilizados para relacionar o nível macro com o microscópico. No entanto, as aulas tradicionais de química não explicitam como o processo de modelagem ocorre. Em vez disso, nessas aulas são enfatizados somente os resultados conceituais, como se esses conceitos fossem fatos declarados, sendo a única alternativa do estudante memorizar os conceitos (Erduran, 2001). Uma alternativa para entender a relação macro e o microscópico seria a inserção dos argumentos pela perspectiva da superveniência, que destaca a relação assimétrica entre os níveis microscópico e macroscópico (Erduran *et al.*, 2007). Assim, para haver mudança nas aulas de química é necessária a inserção de tópicos de filosofia da química na formação de professores, principalmente aspectos conceituais e epistemológicos sobre a relação entre o macro- e o microscópico, para que, conseqüentemente, haja melhora na compreensão de conceitos de química pelos estudantes (Erduran *et al.*, 2007).

Outro trabalho pertinente ao tema modelagem na química é o de Treagust e Chittleborough (2001), os quais defendem que a química se baseia em dar sentido ao invisível e intocável. Desse modo, eles enfatizam o papel da experimentação, principalmente, na explicitação da relação entre as evidências experimentais, os conceitos e os modelos químicos. Em outras palavras, as evidências de reações (produção de gás, calor, mudança de cor, etc.), por exemplo, não desvendam (não têm relação intuitiva com) nada sobre o comportamento submicroscópico dos produtos químicos envolvidos, para o

não iniciado em química. Assim, a dificuldade em entender a química se instaura, pois as explicações para essas evidências sempre são baseadas no nível submicroscópico.

O trabalho de Fernández-González (2011) refere-se a outra relação problemática entre as teorias (entidades ideais) e a correlata realidade empírica na química. Fernández-González investiga o caso das substâncias puras e os reagentes do laboratório, identificando aquelas com entidades ideais, e estes com entidades quase-ideais. Assim, Fernández-González entende que objetos ideais, como as substâncias puras, por exemplo, são construções mentais dos cientistas. Os objetos quase-ideais, que são produtos de laboratório, são as entidades às quais temos acesso no mundo real, e cujas características se aproximam das entidades idealizadas, uma vez que são criados com essa intenção. Com isso, evidencia-se, mais uma vez, a necessidade de trabalhar questões epistemológicas e ontológicas da química, o que pode dar subsídios para a distinção dos diferentes níveis entre os quais a química transita, para se estar mais consciente sobre as relações entre esses níveis.

Outra consideração importante sobre as observações experimentais, a transição entre os níveis macro e submicroscópico e o entendimento da química está no trabalho de Talanquer (2011b). Ele explica que, com o surgimento das tecnologias e procedimentos para explorar o “mundo nanoscópico”, houve uma mescla entre o nível empírico – ou descritivo dos fenômenos observáveis –, com o objeto, a que os modelos e as evidências se referem. Isso porque os resultados da nanomanipulação incorporaram “realidade” ao nível submicroscópico⁶: não apenas as imagens geradas pelos vários microscópios, como o de força atômica, têm um forte apelo gráfico; mas também os resultados das manipulações corroboram as representações que aparecem na tela dos computadores dos instrumentos.

Em contrapartida, Pozo e Crespo (2009) alertam que a perspectiva realista ingênua no ensino de química pode gerar problemas, por exemplo, quando propriedades macroscópicas são estendidas às entidades teóricas, gerando concepções alternativas

⁶ Nível submicroscópico, para Talanquer (2011b) e Bucat e Mocerino (2009), é entendido como sendo o mundo dos modelos, que são entidades ideais, acessadas somente pela imaginação.

acerca do modelo corpuscular da matéria. Outro argumento, nessa mesma perspectiva, é o de Bucat e Mocerino (2009), que ressaltam como necessária a distinção entre a realidade e os modelos e suas representações. Os autores defendem que o uso impreciso da linguagem (pictórica ou verbal) pode ofuscar a distinção entre o comportamento macroscópico e as explicações submicroscópicas. Assim, a correspondência entre modelos e representações pode acarretar na operação sobre fórmulas químicas, em vez de sobre os modelos aos quais se referem. Para isso, os estudantes precisam aprender, e os professores e livros didáticos precisam explicar, as convenções e estilos de representações moleculares. Se, no início da aprendizagem sobre a química for feita a distinção explícita das convenções e estilos de representações, posteriormente haverá maior facilidade para a livre transição entre os três “mundos” químicos (macroscópico, submicroscópico e simbólico).

É interessante notar que há uma confusão entre os níveis de representação, manipulação e entidades ideais da química. Erduran e Duschl (2004) mencionam que os modelos de estrutura química têm sido sinônimo da representação de bola-e-vareta, ou seja, sendo relacionados diretamente à visualização, adquirem existência física. Essa necessidade de modelos concretos é interpretada pelos autores, com o auxílio da teoria piagetiana, como sendo uma referência imprescindível para que os alunos do ensino médio entendam conceitos abstratos da química. No entanto, quando existem vários modelos explicativos para o mesmo referente (por exemplo, os vários modelos para ácido), a suposição de realidade dos modelos provoca confusão, pois nos livros didáticos não há explicação sobre por que um modelo difere do outro, e por que não abandonamos um ou outro.

Para investigar a preferência na utilização de um modelo ou de outro, Coll e Treagust (2001), abordaram a compreensão das ligações químicas entre estudantes do nível médio, graduação e pós-graduação em química. Coll e Treagust salientaram que, mesmo os

estudantes de pós-graduação preferem trabalhar com modelos⁷ tridimensionais para suas explicações, justificando a escolha destes por maior familiaridade, ou maior realidade atribuída aos modelos.

Uma alternativa aos modelos concretos, ou analógicos, nos termos de Harrison e Treagust (2000), seria a utilização de múltiplos modelos para entender as entidades químicas e suas interações. Harrison e Treagust sustentam a ideia de que os múltiplos modelos permitem o entendimento mais científico, pois cada modelo engloba uma fração dos atributos do objeto investigado. A utilização de um único modelo, em contrapartida, sugere a necessidade de se encontrar o modelo “correto” – ou o melhor, analogicamente –, podendo então reforçar a ideia de que a ciência produz verdades últimas, o que contraria as posições filosóficas contemporâneas⁸.

A proposta de Harrison e Treagust (2000) se diferencia, no entanto, da proposta de Mortimer (1995, 1997, 2006) relativa à noção de perfil conceitual. Baseado no perfil epistemológico de Bachelard, Mortimer propõe que, para entender um conceito, é necessário considerar a coexistência de várias formas de pensar, chamadas de “zonas” do perfil, caracterizadas com base nos domínios ou contextos a que esse conceito se aplica, inclusive o entendimento de senso comum. Os fenômenos que tentamos explicar, por serem complexos, não podem ser entendidos inteiramente a partir de uma única perspectiva, havendo a necessidade de visões complementares para produzir um quadro mais completo. As diferentes zonas do perfil “são complementares no sentido de que não podem ser aplicadas ao mesmo problema e também não podem, isoladamente, explicar todos os fenômenos químicos” (Mortimer, 1997, p. 201). Essas zonas são criadas a partir de pesquisas de levantamento de concepções alternativas e da história dos conceitos científicos. Assim, as zonas correspondem a diferentes formas de mediação, a diferentes

⁷ Modelos, para Coll e Treagust (2001) e Harrison e Treagust (2000), correspondem às representações visuais das entidades da química, construídas pela mente dos químicos.

⁸ Sobre os produtos da ciência, vide Matthews (2012); sobre verdades na ciência, vide Niiniluoto (1999).

teorias e linguagens, que traduzem o mundo em suas próprias formas. A altura de cada zona no perfil representa de forma qualitativa a influência de uma determinada característica do conceito. A quantidade de zonas em um perfil é igual para os indivíduos de uma mesma cultura, porém os seus níveis variam, por causa dos compromissos epistemológicos e ontológicos de cada indivíduo, que são influenciados pelas experiências vivenciadas (formação e cotidiano).

Para Araujo Neto (2012), a representação está relacionada a uma entidade química, como no caso da representação estrutural para organização no espaço dos átomos que constituem uma molécula. O conceito de representação na química está diretamente ligado à natureza dos objetos de estudo da química e, portanto, à sua ontologia. Mas, o significado principal da representação na química oscila entre substituição e imitação do representado, não possuindo somente função comunicativa, mas também funções preditivas e explicativas.

Para Justi (2006), o modelo representa uma mediação entre fenômenos e teorias. O modelo tem equivalência à representação, que não exhibe apenas aspectos visuais, mas também aspectos mais abstratos, como é o caso das equações. Assim, a autora expressa que o objeto, a que o modelo/representação se refere, pode ser um fenômeno, ideia, fato ou processo.

Devido à pluralidade semântica encontrada na literatura, a respeito das palavras modelo e representação, Adúriz-Bravo (2012) argumenta que uma teoria científica, sendo constituída por um grupo de modelos que remetem a um sistema empírico que se pretende representar, tem os modelos como mediadores. Os modelos podem ser entendidos como representações do sistema real (perspectiva instrumentalista), ou como substitutos do sistema real (perspectiva realista). Partindo do realismo generalizado entre os químicos da atualidade, no que se refere a teorias e imagens dos modelos atômicos e modelos de ligações químicas, considera-se, no presente trabalho, que os modelos provêm de uma teoria mais geral, descritiva e explicativa, construída a partir de dados experimentais e

corroborada pela síntese de compostos. Em virtude disso, é plausível que um modelo seja comunicado por uma equação ou por imagens; mas, seguindo a perspectiva realista, iremos considerar que modelos e representações têm significados congruentes, apresentando relação direta, ou até mesmo substitutiva, com as entidades teóricas a que eles se referem, no contexto do fazer química.

Souza e Porto (2011, 2012) propõem uma análise semiótica sobre a relação entre fatos, interpretações e representações na química. Para isso, eles utilizam a fenomenologia e a teoria dos signos de Charles Sanders Peirce, na tentativa de esclarecer as estratégias de produção e comunicação do conhecimento químico. Um signo, ao representar um determinado objeto, gera um interpretante na mente do intérprete. Os signos são representações dos objetos, e podem ser de três tipos (se considerada sua relação com os objetos): icônicos, por apresentarem semelhança de qualidades com o objeto; simbólicos, que são relacionados a convenções, referenciando costumes, valores, padrões etc.; ou indiciais, cuja relação com seu objeto é factual: o signo indica seu objeto. No entanto, é importante destacar que nenhum signo mantém apenas um tipo de relação com seu objeto, de forma que todo signo possui níveis de iconicidade, indexicalidade e simbolicidade. Assim, o que pode ser observado é algum grau de predominância de uma ou de outra das dimensões sýgnicas. Em suma, os objetos da química são ideias construídas pela atividade do químico, que interage com a realidade por meio de experimentos (índices) e a interpreta, gerando teorias e modelos. Essas teorias e modelos são disseminados por outros signos, por exemplo, icônicos e simbólicos (linguagem química: desenhos de estruturas moleculares, orbitais, equações químicas, fórmulas moleculares, etc.), e são interpretados pelos estudantes, que geram seus conceitos sobre os objetos criados pela atividade do químico. Portanto, a maneira como se entendem as relações entre o signo e objeto, no processo de comunicação da química na construção de teorias, difere daquela que ocorre na sala de aula. Essas relações podem influenciar a ideia de "realidade" dos alunos. Assim, o modelo proposto por Souza e Porto permite distinguir aspectos ontológicos da atividade

química, marcando a distinção entre a realidade dada, a realidade produzida (no sentido proposto por Bachelard [1984]) e a realidade ensinada.

A este respeito, Izquierdo-Aymerich (2012) defende que a perspectiva histórica-filosófica-didática no ensino da química pode ajudar a compreender melhor a relação entre o fazer química e ensinar química, pois auxilia a identificar questões genuínas da química. Assim, a autora defende que, investigando quais são as competências sobre o fazer químico, se pode melhor orientar a seleção dos fatos e sequências de ensino-aprendizagem na química. A filosofia da química, em particular, valoriza a linguagem química, que é o resultado de muitos anos de reflexão, através das quais metáforas, representações abstratas e experimentos foram construídos e refinados. Assim, o domínio da linguagem química se constitui em uma importante competência que pode orientar a química escolar (Izquierdo-Aymerich, 2012).

Em suma, os autores, tanto da área de filosofia da química, quanto de educação química, defendem a necessária inclusão de questões controversas da química em seu ensino. Para isso, é preciso reestruturar o ensino em todos os níveis (desde a formação de professores até o ensino médio), para diminuir o hiato entre a química escolar e aquela praticada pelos químicos. No entanto, a leitura dos trabalhos aqui apresentados nesta seção não propõe a adição da filosofia da química como um conteúdo a mais, principalmente no ensino médio, e sim a inserção de um pano de fundo filosófico no ensino. Ou seja, sugere-se levar em conta essas discussões filosóficas e explicitá-las, principalmente no ensino superior da química. Além disso, a filosofia da química também não pode ser entendida como uma abordagem metodológica, e sim um meio que procura fundamentar, avaliar e explicitar as particularidades da química, o que contribui para a construção de formas de ensinar química. Deve-se atentar também para o fato de que o fazer químico e o ensino de química devem estar próximos, mas não são equivalentes.

Pautado nesses referenciais, considera-se que as problemáticas educacionais podem se beneficiar de abordagens filosóficas; e as questões filosóficas necessitam ser ampliadas para questões do ensino. Então, há necessidade de mais investigações para a

explicitação de controvérsias sobre teorias químicas, principalmente sobre o processo de apropriação do conhecimento químico.

Capítulo 2 – Objetivos e Construção Metodológica

2.1 Objetivos

Concordamos com a proposição de Hammond e Nyholm (1971), que consideram que, como a *“química é mais bem descrita em termos das coisas que as pessoas que se denominam químicos fazem, torna-se claro existir uma relação entre a química e a forma como ela é ensinada”* (p. 6). Nesse sentido, faz-se necessário investigar o entendimento de como a química funciona, para ter perspectivas de como ela pode ser mais bem ensinada e aprendida.

Mas como investigar esse entendimento sobre a química? Na busca por possíveis respostas a essa questão, considerou-se a importância da investigação das concepções dos sujeitos que fazem a química, pois as concepções *“percebem e interpretam as distintas informações e o ambiente no qual estão imersas”* (Goded, 1999, p. 128). Sendo assim, as concepções de um indivíduo ou grupo, de acordo com determinado ponto de vista, podem subsidiar as discussões e delineamentos filosóficos e educacionais a respeito de como a química funciona.

Considerando essa perspectiva, este trabalho investigou as concepções de 10 (dez) estudantes de doutorado em química sobre aspectos da filosofia da química, por meio das quais se buscou compreender como a química se caracteriza para esse grupo de pesquisadores. De forma mais específica, a pesquisa buscou realizar um estudo das concepções dos pós-graduandos, abordando aspectos sobre o corpo teórico e metodológico da química, realismo, reducionismo, implicações éticas, estéticas e de imagem pública que permeiam a ciência química. Porém, mesmo que o texto abarque todas essas questões, nos aprofundaremos nas discussões a respeito do realismo e do corpo teórico e metodológico da química.

Assim, com os dados e a análise desse estudo, propomo-nos a contribuir para o entendimento da complexidade do funcionamento da ciência química, com a preocupação de suscitar também reflexões sobre como ensinar e aprender química.

Para caracterizar as concepções do grupo investigado, foram criadas, nesta pesquisa, categorias que elencam indícios a respeito de como a química funciona. Dessa maneira, foi articulado um diálogo entre os dados deste trabalho, e as perspectivas da filosofia da química e da educação em química, buscando oferecer elementos que subsidiem a inclusão de discussões da filosofia da química em cursos de graduação e pós-graduação em química – que se acredita poder ajudar na compreensão de aspectos cruciais dessa ciência.

2.2. Construção Metodológica

Para alcançar esses objetivos, foi utilizado um instrumento de pesquisa consistindo em um questionário e de entrevistas semi-estruturadas. Foi adotado o referencial metodológico proposto por Bogdan e Biklen (1994), que consideram o potencial da entrevista, principalmente no âmbito educacional, em termos qualitativos, e oferecem fundamentos para a escolha das entrevistas e a forma de analisar os dados coletados.

2.2.1. Instrumento para coleta de dados

Baseado no referencial de Bogdan e Biklen (1994), o presente estudo utilizou, principalmente, a entrevista semi-estruturada para a coleta de dados. As entrevistas são úteis para recolher dados descritivos na linguagem do próprio sujeito, o que permite ao investigador delinear uma ideia geral sobre as interpretações de aspectos do mundo dos entrevistados (Bogdan & Biklen, 1994), fornecendo, para a presente pesquisa, material para investigar como a química se caracteriza para o grupo de entrevistados.

As entrevistas semi-estruturadas, em particular, possibilitam a comparação entre os entrevistados (por possuírem um guia para a entrevista, semelhante para todos os entrevistados), além de permitirem o esclarecimento de possíveis dúvidas sobre as respostas dos sujeitos no momento da entrevista (Bogdan & Biklen, 1994).

Assim, tendo em vista essa vertente metodológica e o referencial da filosofia da química, foi construída uma primeira atividade que se constituiu em três grandes blocos (Quadro 1 do Apêndice 1): 1) ficha do perfil do entrevistado; 2) entrevista guiada com perguntas; e 3) entrevista guiada por situações. Todas as entrevistas foram gravadas em áudio e transcritas para posterior análise.

O primeiro bloco teve como objetivo traçar um breve perfil dos entrevistados e, por isso, foi utilizado um questionário como meio de coleta desses dados.

No segundo bloco foi feita a entrevista semi-estruturada, abrangendo:

- os motivos da escolha pela graduação em química e pela pós-graduação em determinada sub-área da química, buscando investigar aspectos relacionados à imagem pública da química como ciência e como profissão;
- o que o entrevistado considera típico da atividade do químico, a fim de buscar dados sobre as peculiaridades da ciência química e da profissão de químico;
- a escolha de um símbolo (logotipo, imagem, desenho) que representasse a área de pesquisa do entrevistado, para investigar aspectos estéticos e de especificidades de química (Root-Bernstein, 2003; Schummer, 2003b).

O terceiro e último bloco da entrevista foi guiado por questões associadas a fragmentos de artigos de pesquisa em química, e por frases relacionadas à natureza da química. Este terceiro bloco foi inspirado em artigos da área de filosofia da química que discutem, a partir de publicações em química, aspectos do realismo e do reducionismo (Jenkins, 2003; Labarca & Lombardi, 2010; Scerri, 2000b). Dessa forma, esse instrumento possibilitou trabalhar tópicos de filosofia da química (descoberta científica, realismo, reducionismo) utilizando textos com estilo textual familiares aos entrevistados.

Foram entrevistados 10 doutorandos em química, sendo dois de cada sub-área: físico-química (QF1 e QF2), analítica (QA1 e QA2), orgânica (QO1 e QO2), inorgânica (QI1 e QI2) e bioquímica (QBQ1 e QBQ2). Para a seleção desses atores da pesquisa, considerou-se, além da área da química em que o doutorando está trabalhando, a facilidade de abordagem e disponibilidade dos pós-graduandos em participar das atividades propostas.

Primeiramente, foi realizada essa atividade com três pós-graduandos, como um teste para identificar eventuais dificuldades na metodologia, como duração da entrevista e entendimento das perguntas e dos fragmentos de artigos. Como não foram constatados inconvenientes, a atividade foi, em seguida, realizada com os demais sujeitos pesquisados.

Depois da transcrição⁹, e feita uma leitura inicial do material do primeiro grupo de entrevistas, iniciou-se a análise dos dados. Observou-se então a necessidade de fazer novas entrevistas (segundo grupo de entrevistas) com todos os doutorandos, visando esclarecer, detalhar e aprofundar o entendimento de suas concepções. Esse segundo momento baseou-se no referencial de Bogdan e Biklen (1994), buscando-se esclarecer como os pós-graduandos interpretam os significados das suas próprias falas. Assim, aos doutorandos foram dadas palavras, retiradas da transcrição da primeira entrevista, e lhes foi solicitada a escrita de um parágrafo utilizando todas essas palavras. Após a leitura do parágrafo escrito pelo pós-graduando, foram mostrados a ele os trechos da entrevista, de onde foram retiradas as palavras e, em seguida, se perguntou diretamente quais as relações entre as palavras selecionadas e seu significado. Essa etapa também foi gravada em áudio para posterior transcrição. Ressalta-se que cada roteiro da segunda entrevista tem sua particularidade¹⁰, pois trataram-se de pessoas diferentes e, portanto, de entrevistas diferentes. No entanto, selecionamos trechos que inclinavam a discussões sobre temas comuns, para comparar os dados entre as duas entrevistas e entre os entrevistados. É importante destacar que esta última etapa não teve o intuito de validar o instrumento utilizado na pesquisa, mas sim aprofundar a interpretação dos dados obtidos. O processo da segunda rodada de entrevistas está exemplificado a seguir, no Quadro 1.

Quadro1- Exemplo de atividade da segunda entrevista.

<p>1. Fragmento de onde foi retirada a lista de palavras:</p> <p>Lemes: bom... então eu gostaria que você me falasse... qual que é a relação entre esse gráfico... a tabela e a molécula... são três formas de falar a mesma coisa? ou não... são diferentes?</p> <p>QA1: é... na verdade... o que eu penso... sem analisar nada especificamente... esse aqui ((tabela)) caracteriza cada <u>pico</u> né? e juntando essas informações você chega na <u>molécula</u></p> <p>Lemes: isso é uma evidência experimental? o que o infravermelho te dá?</p> <p>QA1: na verdade é um quebra-cabeça né? cada <u>pico</u> <u>você</u> <u>obtem</u> <u>um</u> <u>estiramento</u>... e você consegue por meio</p>
--

⁹ Foram adotadas as regras de formatação de transcrição de Preti (1999).

¹⁰ Os roteiros da segunda rodada de entrevistas para cada doutorando estão no Quadro 2 do Apêndice 1.

desse estiramento... várias peças do quebra-cabeça e vai juntando uma a outra até chegar na figura desejada (...)

Lemes: sim... sim... continuando... se um aluno trouxesse essas notícias pra você... como você explicaria o que elas veiculam? o que ele mostra... o que ele traz de novo....

QA1: o que ele tá mostrando? pra mim... uma descoberta científica... os orbitais d já existem e ele tá mostrando isso... trazendo ao mundo... provando que isso existe... os buracos d do átomo de cobre... e também mostrando a existência da ligação desse composto... muito legal isso...

Lemes: e esse outro?

QA1: mesma coisa...a partir daquilo que já existe... consegue mostrar... provar...

(...)

1.2. Lista de Palavras:

Molécula, pico, estiramento, orbitais, ligação, átomos

1.3 Parágrafo escrito pelo pós-graduando:

Considerando uma **molécula** de água, os **orbitais** dos **átomos** de hidrogênio juntamente com os **orbitais** dos **átomos** de oxigênio formam uma **ligação** química formando uma **molécula** de água. O infravermelho ao entrar em contato com a **molécula** de água promove um **estiramento** das suas **ligações** químicas e este **estiramento** gera um **pico** característico do **estiramento** da molécula de água.

2. Entrevista estruturada a partir da transcrição e do parágrafo escrito pelo pós-graduando:

Lemes: e aí a gente ficou na dúvida se quando você pensa... o objetivo é saber como que os dez químicos pensam... na questão do estiramento... você pensa as ligações como orbitais?

QA1: sim... sim... são os orbitais que se sobrepõem e formam a ligação química né?

Lemes: porque o que a gente poderia pensar que quando está falando de estiramento C dupla C por exemplo... a gente representa como se fosse...

QA1: uma dupla...

Lemes: É... risquinhos e a gente fala de mola que puxa e tals... não fala do modelo do orbital...

QA1: não... pera aí... eu acho que são duas perguntas separadas... volta a primeira pergunta... como é que eu penso o quê?

Lemes: a ligação química... se a ligação química do orbital é a mesma quando você pensa no estiramento do infravermelho.

QA1: se é os orbitais se movendo? na prática... sinceramente... eu não penso em orbitais... agora se você me perguntar... como é que forma as ligações químicas... o que vem na cabeça são os orbitais... a sobreposição né? aqui no caso a sobreposição dos orbitais p

Lemes: então quando vai pensar numa coisa mais prática...

QA1: mais prática... no dia-a-dia não... por isso... no entanto... eu tive dificuldade agora de escrever ((sobre orbitais))... porque é o que eu te falei... na prática a gente não... não acaba trazendo... AH/ porque tá acontecendo isso por causa do orbital lá lá lá lá lá lá... não/ praticamente falando aqui do infravermelho... é o estiramento das ligações químicas... mas não chega a pegar o básico... o be-a-bá né? o que gerou a ligação química

Lemes: então pra gente considerar que tem estiramento... a gente tem que considerar que existem ligações químicas...

QA1: e que existem orbitais e que existem elétrons...

Lemes: e que existem átomos... pra tudo isso fazer sentido...

QA1: sim... por que uma coisa leva a outra né?

2.2.2. Sistematização dos dados: a organização para a análise

Após o término da coleta e transcrição dos dados da segunda rodada de entrevistas, iniciamos uma nova elaboração do sistema de análise de maneira qualitativa, conforme proposta de Bogdan e Biklen (1994): a partir da leitura dos dados, das questões de investigação e sob influência do referencial teórico do ensino e filosofia da química, originaram-se determinadas categorias. A categorização teve o intuito de classificar os dados transcritos, codificando-os. Com essa codificação, surgiu uma organização do conjunto de dados (subcategorias), que pode descrever a forma como os sujeitos definem a situação ou tópicos particulares.

A proposta de análise qualitativa de Bogdan e Biklen (1994) forneceu os instrumentos, a estrutura e os direcionamentos a serem seguidos na pesquisa. Assim, o processo de construção das categorias se deu pelo diálogo constante, um processo de idas e vindas entre os referenciais teóricos da filosofia e ensino de química, dados, discussões em congressos e reflexões dos pesquisadores.

Nessa perspectiva, as categorias foram criadas a partir das regularidades, padrões e tópicos presentes nas falas (que foram grifadas nas falas transcritas), em consonância com a influência do referencial teórico filosófico e educacional da química, que permitiu dar conta de aspectos relevantes para entendermos as formas com que os sujeitos lidam com o conhecimento químico. As categorias criadas são parte da análise que ressaltam e

organizam os dados (sentenças destacadas com sublinhado nas falas), dando mais fluidez à discussão sobre como a química se caracteriza para o grupo de entrevistados.

Primeiramente, foram organizados os dados obtidos no primeiro bloco (respostas ao questionário), por meio da construção do Quadro 2, que mostra os perfis dos entrevistados.

Quadro 2 – Perfis dos entrevistados

Perfil Doutorandos	Graduação	Mês e ano de ingresso	Doutorado direto?	Fez estágio PAE¹¹?	Trabalhou em indústria ou outro tipo de empresa?	Já lecionou?
QF1	Química	Março/2006	Não	Sim – química quântica; química geral	Sim – 2 anos - indústria farmacêutica – controle de qualidade	Sim – 6 meses (ensino médio)
QF2	Química	Novembro/2009	Não	Sim – química geral II	Sim – 2 anos - laboratório de combustíveis	Sim – 2 anos (ensino médio)
QA1	Química	Fevereiro/2008	Não	Sim - química analítica ; e química analítica instrumental	Não	Não
QA2	Química	Junho/2011	Não	Sim – química analítica	Não	Sim – 6 meses (ensino médio)
QO1	Química	Fevereiro/2008	Sim	Sim – Orgânica I e estrutura e propriedade dos compostos orgânicos	Sim – 4 anos em laboratório de análise clínicas	Não
QO2	Química	Agosto/2008	Não	Sim - química orgânica	Não	Sim – 6 meses (ensino

¹¹ O Programa de Aperfeiçoamento do Ensino (PAE) tem o intuito de contribuir com a formação pedagógica do pós-graduando da USP. Nesse Programa, o pós-graduando cursa uma disciplina de preparação pedagógica e, posteriormente, realiza um estágio supervisionado em docência em uma disciplina da graduação da área de conhecimento pertinente ao seu curso de pós-graduação (USP, 2005).

				experimental e química orgânica II		Médio); 6 meses (graduação); 1 ano (curso pré-vestibular)
QI1	Química	Fevereiro/2011	Não	Não	Sim – 1 ano – museu de ciências	Sim – 1 ano (ensino médio)
QI2	Química	Março/2009	Não	Sim – físico-química	Não	Sim – 5 anos (ensino médio)
QBQ1	Química	Março/2009	Não	Sim – bioquímica experimental ; química de biomoléculas; e bioquímica	Sim, 1 ano e meio – empresa de validação de métodos de quantificação analítica de resíduos de defensivos agrícolas em vegetais e frutos comerciais	Não
QBQ2	Química	Março/2009	Sim	Sim – biologia molecular	Não	Não

Para organizar as transcrições do primeiro conjunto de entrevistas, foram extraídas frases ou palavras que representavam aspectos das concepções dos pós-graduandos. Essas frases e palavras foram organizadas em um quadro (Quadro 3), conforme os assuntos explorados na atividade. Isso permitiu observar as palavras chave das respostas dos doutorandos, possibilitando um olhar mais dinâmico e global sobre os dados, e a criação de categorias de análise.

Quadro 3 – Mapeamento dos dados brutos da primeira entrevista.

Assuntos explorados nas entrevistas Doutorandos	Porque escolheu química como graduação	O que fez escolher a área do doutorado	O fazer químico	Descrição do que simboliza sua pesquisa	O que representa o espectro de infravermelho	O que é uma descoberta científica	Conseguimos, ou não, ver orbitais	Reduccionismo
QO1	Afinidade no Cursinho; Possibilidade de Emprego	Casualidades	Preparar soluções	Átomo, polímero com medicina	Sinal de carbonila	Ter impacto em toda a química	Com dados da distribuição eletrônica, podemos ver orbitais	Química é mais experimental; trabalha com moléculas; não átomo isolado; biólogo- teste biológico do produto.
QO2	Biologia decoreba; física cálculos;	Laboratório	Trabalha com substâncias; interação da matéria com alguma coisa	Elementos com números atômicos	Mudança em estiramento	Resultado bem diferente que a pessoa esperava; algo que não acontece todo dia	Com dados da distribuição e densidade eletrônica, para observar a estrutura do óxido de cobre; equipamento traz a interação disso com isso	Que a química e a física sempre andam lado a lado; química preparar substâncias; químicos não observam átomos e sim o todo; químico: a reatividade de um composto
QA1	Facilidade na parte de estequiometria	Aplicada a sociedade	Estudar o comportamento químico das moléculas	Fazendo uma formulação	O pico é o estiramento.	Explicar o que a gente vê; trazer a tona	Pela técnica, provou-se que os orbitais existem; mostrou a existência da ligação desse composto	Não existe fronteiras; interdisciplinar; não preciso de quântica pra minha pesquisa
QA2	Misturar algo pra ver no que dava	Questões de sociabilidade	Pela química você pode ver todos os lados do conhecimento; na química você explica o porque está acontecendo em nível molecular	Imagem do equipamento	Sinal decorrente a um determinado grupo	Algo aplicável	Conseguimos fazer um mapa da densidade eletrônica do material	Relação entre as duas; química parte empírica; física parte teórica
QBQ1	Enxergar e entender as moléculas	Estudar química dentro da biologia.	Abstração de quantidade; sistematizar experimentos; se importa com as partes dentro da molécula	Uma célula se dividindo e a parede que se forma no meio, é um polímero.	Grupos na molécula vão ter uma transmitância	Uma coisa que você já imagina ou você observa; ou as vezes ao contrário	Eles estão vendo é densidade eletrônica	Interdisciplinaridade
QBQ2	Que pela química eu podia ir pra genética; química tem números.	Escolhi bioquímica e não biomol, por que biomol é micro demais para eu ver. Na bioquímica, tá colorido, eu vejo que a extração tá funcionando	Ter capacidade de abstração; ter fé	Uma macroalga dentro de uma gota para simbolizar extração	As vibrações das ligações de cada átomo	De repente aconteceu e a gente não sabia explicar e a gente foi atrás e parece que é isso	Mapear a distribuição eletrônica do óxido de cobre; dados de microscopia que <u>aparentemente</u> provam que existem	Física e a química andam estupidamente conectadas; física fórmulas; química sem "numeralhas"
QF1	Mais chances de emprego; Professores e afinidade	Professores e afinidade aos cálculos	Preparar soluções; Eu não ponho a mão na massa, desde 2005	Modelo de Rutherford ou o psi	Modelo que explica os modos vibracionais dessa molécula	Um impacto na química como um todo	São simplesmente funções matemáticas	O físico prefere olhar pra equação, enquanto o químico prefere olhar para o orbital

Assuntos explorados nas entrevistas Doutorandos	Porque escolheu química como graduação	O que fez escolher a área do doutorado	O fazer químico	O que simboliza sua pesquisa	O que representa o espectro de infravermelho	O que é uma descoberta científica	Conseguimos, ou não, ver orbitais	Reduccionismo
QF2	Campo de trabalho; pela área de exatas	Trabalhar com algo aplicado	O estudo das transformações da matéria; Como produzir novos produtos; como entender como esses produtos interagem	Um erlenmeyer com uma folha	Mede, a frequência de vibração das ligações	Ser algo novo, não necessariamente um produto; pode ser algo que não ou algo que já existe, mas a gente não tem como determinar	Orbital não existe. Existe é uma representação gráfica de uma equação; Você ta medindo. Você não ta fazendo uma imagem disso.	Química, é a física da eletrosfera; leis da física são difíceis de aplicar a química; de aplicar as equações a compostos maiores. química é uma ciência experimental
QI1	Você mexer com as coisas, com tudo que existe	Aplicado	Fazer soluções	Uma hemoglobina com o ferro lá dentro; Nos Insetos é o cobre na hemoglobina e muda tudo.	Ele representa os tipos de ligações; comportamento das ligações quando são estimuladas	Novidade	Está observando uma imagem que ele obteve através de uma técnica	Ideia de relacionamento entre toda a ciência
QI2	Desafiadora – síntese: na teoria é bonito; na pratica não é igual.	Ir mais a fundo na química; estudar estrutura da matéria e mecanismos de reação; o porquê das coisas	Laboratório; estuda os compostos químicos	Composto de coordenação com o símbolo da fotoquímica	Tipo de vibração da molécula	Ao acaso, inesperado – relacionado a aplicação	Programa computacional que faz essas formas de orbitais	Eu acho que ta tudo mais ou menos interligado

A partir da leitura e primeira análise dos dados sumarizados no Quadro 3, buscamos o entendimento de como a química se caracteriza, procurando abranger o que foi mais ressaltado pelos entrevistados: a relação entre as teorias e modelos sobre ligações químicas, e as evidências experimentais mediadas e não mediadas por instrumentos.

Após a transcrição do segundo grupo de entrevistas, organizamos os trechos dessas falas, com o mesmo intuito do que foi feito no Quadro 3, o que levou à obtenção do Quadro 4.

Quadro 4 - Mapeamento dos dados brutos da segunda entrevista.

Doutorandos	Tópicos explorados nas segundas entrevistas				
	Ligações compreendidas no infravermelho	Realismo químico e evidências experimentais	Explicações relacionadas ao orbital/ conceito de orbital	Relação do orbital com funções ou cálculos matemáticos	Relação da química com a aplicação
QO1	Detecta grupos nas moléculas; pensa em ligações mais simples no infravermelho	Grupos volumosos dificultam as reações	Orbitais são para ir um pouco mais além; Distribuição eletrônica = orbital	"É mais ou menos por cálculo tudo que geralmente faz em termos orbitais ...é através de cálculos teóricos que mostram ... que forma tem o orbital..." ;orbital = densidade eletrônica	"Químicos sintéticos desenvolvem continuamente tecnologias para tornarem as carbonilas mais reativas"
QO2	No infravermelho se enxergam os estiramentos e a distribuição eletrônica; concepção icônica sobre a ligação	Orbitais existem e é "um conceito que se utiliza para se entender várias observações na prática"; teoria é "algo que você observa na prática"(...) "orbitais, eles criaram, pra explicar por que tal átomo é desse jeito"; moléculas existem	Orbital difícil; orbitais são para entender o efeito; orbital "é algo que a gente aprende, mas muito na parte qualitativa"; Orbital = distribuição eletrônica	Cálculos + dados qualitativos = observar impedimento estérico	Não foi explorado esse assunto
QA1	Estiramento da ligação na explicação do que acontece no infravermelho	Existem orbitais, elétrons	Ligações químicas = sobreposição de orbitais; orbitais geram a ligação química; "na prática, sinceramente, eu não penso em orbitais"	Não foi explorado esse assunto	Não foi explorado esse assunto
QA2	"Picos de transmitâncias característicos de transições eletrônicas e/ou agrupamento de orbitais e ligações químicas"	"Através de teoria de orbitais moleculares você pode estar explicando certa rigidez que uma ligação tem. Se ela é sujeita a rotações, estiramentos(...)"; "certo grupo foi estudado, foi provado que existe aquilo lá e vai pra base de dados."	"Densidade eletrônica de átomos"; "eu não chego nesses modelos [orbitais]. Fico mais na energia pra tirar um elétron ou ganhar um elétron no sistema."; É mais complicado imaginar orbitais nas ligações metálicas	Não foi explorado esse assunto	"A caracterização de compostos pode ser realizada pela observação de dados experimentais."
QBQ1	"Os orbitais a gente usa pra pouca coisa. Por que ele é mais complexo, porém mais abrangente."	"Exemplo de grupo funcional é a carbonila e sua presença em uma molécula pode ser detectada por diversas técnicas"	"Não preciso desse grau de resolução [orbital] pra eu poder olhar uma proteína."	"Orbitais são uma expressão matemática que descreve a densidade eletrônica dos átomos"	"Síntese de uma molécula por tal técnica"
QBQ2	Pensa como ligações e não como distribuição eletrônica; distribuição eletrônica é mais bonito e são para técnicas mais avançadas. Ex: RMN com spin nuclear	"Usando das mais variadas técnicas espectroscópicas e espectrométricas, podemos 'enxergar' uma molécula e seus átomos, seja pela massa que apresentam, pela vibração de suas ligações ou por tantas outras propriedades"	Distribuição eletrônica = mapeamento de elétrons/localização dos elétrons	Não foi explorado esse assunto	a partir dos dados do espectro "Vamos decifrar esse negócio"
QF1	"Já passou muito tempo na minha cabeça como risquinho [a ligação]"; Hoje, para ele, vibração de ligação é: "o movimento	"A teoria explica os modelos moleculares"; "tem muita gente que fala "ah! Orbital não existe"... existe, claro que existe... só que é um	Orbitais = o módulo quadrado das funções matemáticas de onda	"Modelos teóricos baseados em funções matemáticas mais complexas (resoluções aproximadas da equação	"Eu fiz um trabalho que o sistema era uma reação que acontecia na atmosfera de Titã, que

	dessa atração e repulsão, que dá a característica desse espectro vibracional"	conceito muito complexo... é difícil"		de Schrödinger), podem prever de forma mais acurada não só a estrutura molecular (ligações químicas), mas também seu espectro vibracional."	é uma lua de Saturno, e foi um trabalho interessante. Então eu acho que na verdade foi o trabalho mais legal que eu fiz"
QF2	"Ligação química é a atração entre esses dois átomos e essa atração ocorre eletronicamente"	"A espectroscopia Raman (...) [permite] a análise de misturas e detecção de moléculas através da medida das vibrações moleculares, que são as variações de distância de ligação entre os átomos das moléculas."; "Só não tô vendo essa ligação! Mas essa ligação existe..."	"Calcula a equação pra vários pontos, você tem vários pontos ao redor de um eixo... e aí você chama isso de um orbital"; "O orbital é só uma forma da gente tentar representar como essa ligação ocorre"; "distribuição eletrônica são vários orbitais"; "a gente usa o orbital só pra encaixar os elétrons"	"Orbital é uma interpretação de uma equação"	Não foi explorado esse assunto
QI1	"Usando modelos de bolinhas mesmo, o professor pode mostrar em aula do que se trata o estiramento e outras vibrações no infravermelho"	"Sim, as moléculas são ligadas... elas interagem... a gente chama de interação de ligação"; "a gente sabe que tem... a gente estuda isso... mas não dá pra enxergar... enxergar, quando eu digo, é enxergar com o olho mesmo. Não ... uma limitação ótica"	"Um gráfico matemático no caso da representação dos orbitais"	"Um gráfico matemático no caso da representação dos orbitais"; "Aquilo é uma representação matemática, de uma técnica que te dá uma região com densidade eletrônica que o átomo tá ali"	Não foi explorado esse assunto
QI2	"Através de teoria de grupos; de orbitais moleculares (...), consegue interpretar bem espectro"; "é que a simetria da molécula tem a ver com a energia dos orbitais (...) relacionar isso com o espectro eletrônico vibracional"	Usa a técnica "pra interpretar a estrutura tridimensional de moléculas..."; "Existem [orbitais] e por isso que a molécula... por causa dessa forma, por isso que a molécula tem ... um metano é tetraedro."	"A distribuição de carga nesses orbitais, é que vai influenciar na simetria"; "se eu quero dar uma aplicação, primeiro eu tenho que tentar pensar nos orbitais, pra depois ver qual o modelo de molécula que vai me dar aquela propriedade"	"Isso [imagens de orbitais] aí é feito através de cálculos da mecânica quântica... coordenadas polares... dá pra chegar nessa forma."	"Eu acho que doutorado, pesquisa, tem experimento... por que também não tem sentido eu fazer algo que já tem, né? (...) Tem que tentar fazer alguma modificação... ou aplicar..."

Diante desses dois quadros, foi possível comparar os dados da primeira e da segunda entrevistas, originando-se a categorização que será apresentada na próxima seção.

Capítulo 3 - Características da química segundo os doutorandos: discussão de aspectos filosóficos e educacionais

3.1. Categorias¹²

Após uma visão panorâmica de todos os dados, dada pelos Quadros 3 e 4, as falas foram agrupadas, gerando categorias e subcategorias. Dessa maneira, buscou-se retratar como os pós-graduandos caracterizam o conhecimento químico (Quadro 5).

Quadro 5 – Categorias e subcategorias criadas a partir da leitura dos dois conjuntos de entrevistas.

CATEGORIAS	SUBCATEGORIAS
Características da área de atuação da química	Presença profissional no setor produtivo
	Aplicação prática
	Desenvolvimento de novas formas de explicação
	Interfaces com outras ciências
Características do pensamento químico	Realismo químico com referência a imagens
	Realismo químico sem referência a imagens
	Valorização das evidências experimentais
	Caráter qualitativo e relacional entre as entidades químicas
	Utilização de múltiplos modelos

¹² Todos os trechos das falas dos entrevistados, relacionados a cada categoria e subcategorias, estão organizados no Apêndice 2.

As categorias “características da área de atuação da química” e “características do pensamento químico” foram criadas a partir da distinção observada entre referências feitas ao campo de trabalho dos químicos e às peculiaridades das teorias e metodologias químicas, respectivamente. As subcategorias expressam, assim, aspectos da percepção dos sujeitos sobre a química, de forma mais detalhada, a partir do conhecimento que eles explicitaram e que estão reunidos no significado das duas grandes categorias.

Há que se ressaltar que as categorias e subcategorias propostas não estão diretamente ligadas a cada um dos “temas das atividades” das entrevistas, pois há tópicos particulares que perpassam vários temas ao longo da entrevista. Outro ponto a se destacar são as repetições de trechos de entrevistas em diferentes categorias e subcategorias, ou seja, as categorias e subcategorias não são necessariamente excludentes.

3.1.1. Características da área de atuação da química

A categoria “características da área de atuação da química”, foi dividida em subcategorias que expressam o entendimento dos entrevistados sobre a esfera de trabalho dos químicos e trazem elementos que englobam as origens e desenvolvimentos de suas relações sociais.

3.1.1.a. Presença profissional no setor produtivo

A concepção representada pela subcategoria “presença profissional no setor produtivo” foi observada tanto da análise dos perfis dos entrevistados (Quadro 2), quanto das falas dos pós-graduandos, quando perguntados sobre as razões da escolha da química como curso de graduação, ou quando questionados sobre o que fazem em suas pesquisas.

Em relação às experiências no campo de trabalho da química, levantadas no Quadro 2, os doutorandos trabalharam em laboratórios de indústrias e empresas, bem como lecionaram ou fizeram iniciação docente, além de trabalhar em pesquisa acadêmica. Com isso, podemos observar o amplo campo de trabalho da química, o que foi reforçado na

análise das respostas das entrevistas, como sendo uma característica dessa ciência. Schummer & Spector (2007) exploram essa ideia, descrevendo a química como sendo “ao mesmo tempo acadêmica e industrial, conceitual e aplicada” (p.35). Kovac (2001) ressalta que a indústria tem uma relação simbiótica com a química acadêmica, e defende que esta relação estreita é incomum, pois não há indústria “física”, “biológica” ou “geológica”, mas existe a indústria química. Com isso, Kovac ilustra a ligação entre as pesquisas chamadas “puras” e “aplicadas” em química, que constitui uma peculiaridade da área química.

Ainda no Quadro 2, podemos observar que quase todos os entrevistados tiveram experiência docente no PAE, exceto o doutorando QI1, e que apenas os entrevistados QO1, QA1, QBQ1 e QBQ2 não lecionaram para o ensino médio. Outro fato a destacar é que todos fizeram o estágio de iniciação à docência em alguma disciplina de sua área de pesquisa, exceto QI2 (que o fez na físico-química) e QI1, que ainda não fez o estágio no ensino superior.

Nas falas seguintes também se encontram exemplos de termos que caracterizam a categoria “presença profissional no setor produtivo”:

QBQ1: *já/ trabalhei com físico-química... microscopia Raman... trabalhava com espectroscopia... basicamente... depois eu fui pra bioquímica direto... eu trabalhei com Schistosoma mansoni... um verme e depois eu fui trabalhar na indústria... daí eu trabalhei com analítica... bastante com analítica... com quimiometria... com análise de traços de agrotóxicos em amostras vegetais... então três coisas diferentes uma da outra*

QF1: *talvez assim... na época ((do vestibular))... na minha cabeça... eu tinha ideia que tipo... a química eu vou ter mais chance de conseguir emprego depois de formado... acho que na física não e química eu teria... daí eu acabei ficando em química*

QI2: *((o meu vizinho)) contava sobre o que ele fazia ((trabalhava na indústria))... e aí depois como ele contava assim... depois eu ja bem na escola ele meio que me ensinava... aí foi isso que me motivou ((a fazer química))...*

QI2: *((...) na indústria é bem diferente ((da academia))... muitas vezes o químico... ele inicia na indústria no laboratório... mas depois vai trabalhar na parte administrativa... acontece muito isso... (...)*

vi a palestra de um cara da criminalística que... pelo fato de ele ter doutorado em orgânica... ele era uma pessoa diferenciada lá e aí hoje ele é diretor do instituto de criminalística da Polícia Federal... ele já não mexe mais em laboratório... ele trabalha mais na parte administrativa... e com o conhecimento que ele teve no doutorado... ele pôde comprar equipamentos de última geração... porque ele entende das técnicas né? então... antes que os laboratórios tinham poucos... tipos de procedimentos... experimentos muito ainda arcaicos né? ele conseguiu inovar colocar equipamentos modernos... espectrometria de massas... RMN... equipamentos de última geração... então interessante a palestra que ele deu... tem gente que trabalha na parte comercial também... tem outros segmentos

Q01: *na verdade eu comecei gostar de química no cursinho... durante o ensino médio eu nem pensava em fazer química... eu queria fazer biologia... eu vi que em química... que eu podia ter muito mais possibilidade de emprego talvez... mais do que em biologia... biologia é mais restrita a pesquisa ou a lecionar... química você tem como lecionar ou trabalhar na indústria ou você partir pra pesquisa... então por isso que eu escolhi... e eu comecei a gostar mesmo e ter afinidade no cursinho*

Fica evidenciado, pelo conteúdo das falas acima, que os químicos podem se envolver em diversas atividades – industriais e comerciais, além das de ensino da disciplina e da pesquisa acadêmica (pura ou aplicada) –, sendo essa diversidade, muitas vezes, a causa da escolha pela química como carreira. Esta característica, para Schummer & Spector (2007), é entendida como benéfica para a química, destacando-a das outras ciências, as quais não têm essa pluralidade de campos de trabalho, como também é sugerido pelos sujeitos nas falas acima.

Baird (2002), discutindo sobre as mudanças na definição do campo de atuação dos químicos analíticos, expõe que a pluralidade traz também uma crise de identidade. Esta crise esteve relacionada com a mudança de métodos químicos para métodos físicos na identificação e separação das substâncias químicas. Assim, com a utilização de fundamentos teóricos da física, ou mesmo da engenharia, a química analítica desenvolveu mais métodos instrumentais, o que ressignificou o que era e o que fazia o químico analítico. No entanto, a incorporação desses instrumentos encareceu a pesquisa, criando a necessidade de estreitar parcerias com o setor produtivo para possibilitar a compra de mais

equipamentos. A química analítica, então, ampliou o campo de trabalho da química, sendo integrada aos interesses de caracterização e controle¹³ de produtos químicos, além de produção de instrumentos comerciais e para a academia.

Kovac (2001) salienta que essa flexibilidade de funções dos químicos – que pode beneficiar tanto o setor produtivo, quanto a universidade – pode conduzir à não reflexão sobre problemas éticos diretamente relacionados a aspectos financeiros. A injeção de capital do mercado influencia na cultura de valorização de pesquisas aplicadas e na depreciação das pesquisas puras, exploratórias, sem utilidade direta, mas que poderiam subsidiar, a longo prazo, as pesquisas aplicadas.

O que é importante no presente contexto é que a presença profissional no setor produtivo parece ser uma grande característica que o químico desenvolveu no universo produtivo, o que ganhou espaço em vários setores. Entretanto, as diversas áreas que o químico pode atuar estão ficando imbricadas, fazendo com que metas características da indústria, por exemplo, sejam transpostas de forma comum na academia, sem a devida reflexão sobre as suas implicações. Então, por um lado essa subcategoria traz elementos que tornam a química peculiar, dando subsídios a argumentos contra o reducionismo. Por outro lado, porém, esses elementos se relacionam à falta de reflexão sobre como se estão estabelecendo as relações entre a química e as áreas do setor produtivo, com possíveis reflexos sobre o modo como essa ciência é ensinada.

3.1.1.b. Aplicação prática

Nessa perspectiva, pode-se relacionar a subcategoria da ênfase da “presença profissional no setor produtivo”, com a subcategoria “aplicação prática”. Corroborando a opinião de Kovac, foi percebido nas falas dos doutorandos uma grande valoração da aplicação. A referência à aplicação surgiu quando se perguntou aos doutorandos sobre as razões da escolha de sua área de pesquisa, e o que seria uma descoberta científica na

¹³ Controle envolve o uso de vários tipos de mecanismos de monitoramento de informações sobre a produção e utilização de materiais e substâncias químicas (Baird, 2002).

química. Essa subcategoria está associada a aplicação no sentido amplo, indo além da aplicação dos frutos das pesquisas na indústria, o que é exemplificado pelas falas seguintes:

QA1: (...) *eu já comecei na química analítica... tentando... nesse sentido... tentar unir a universidade a sociedade... foi basicamente isso... eu pensei ...vou desenvolver métodos analíticos para resolver problemas da sociedade...*

QA1: (...) *é o que eu acho também... por exemplo... já me perguntaram... porque precisa saber orbital molecular... e eu tenho dificuldade pra responder isso... o que essas grandes teorias... teorias pesadas atrás da química... o que ela pode me ajudar a resolver problemas sociais? será que não é uma perda de dinheiro público? que é o que me questionaram...*

QF1: (...) *eu fiz um trabalho que o sistema era uma reação que acontecia na atmosfera de Titã que é uma lua de Saturno e foi um trabalho interessante...então eu acho que na verdade foi o trabalho mais legal que eu FIZ/ (...)*

QF2: (...) *a parte de química básica... o desenvolvimento de teoria é muito importante... mas a aplicação eu acho muito mais necessária...*

QI1: (...) *nosso laboratório aqui... que a gente trabalha pro professor B. é de bioinorgânica... então eu trabalho com alguns compostos metálicos... química teórica... síntese de complexos... mas sempre aplicado pra alguma área medicinal... (...)*

Analisando as falas acima, revela-se a grande associação da pesquisa com a necessidade de utilidade, principalmente para a sociedade. Essa questão repercute, segundo Sjöström (2007), na falta de reflexões dos químicos sobre os seus objetivos de pesquisa, e, até, sobre os objetivos da educação química. Isso transparece na sua imagem pública, perpetuando a ideia de que a pesquisa remete somente ao desenvolvimento de melhorias constantes para a sociedade moderna.

Schummer (1997b e 1997c), em contrapartida, defende que a importância dada à aplicação, pela química, é uma das características que a destaca das outras ciências. O

autor argumenta que a produção de novas substâncias, como cerne da atividade química, demanda mais investigações, pois as novas substâncias precisam ser caracterizadas e, conseqüentemente, surgem novas perspectivas de utilização prática e tecnológica. No entanto, mesmo a aplicação sendo a maior justificativa para a arrecadação de mais fundos para sintetizar novos produtos, a relação entre a síntese e a aplicação não é imediata (Schummer, 1999). Por consequência, Schummer observa que o objetivo da química não é a aplicação do conhecimento, muito menos geração de conhecimento para o entendimento do mundo: o objetivo da química é fazer substâncias. A produção de novas substâncias acarreta a definição de novas propriedades químicas, conceito relacional que demanda pluralidade metodológica (Schummer, 2010). Assim, cada substância aumenta o alcance do conhecimento químico, pela incorporação de novos conhecimentos, sem alterações súbitas no corpo teórico da química, que aumenta como se fosse uma “colcha de retalhos”.

3.1.1.c. Desenvolvimento de novas formas de explicação

No que se segue, chama-se a atenção para a relação entre a aplicação e a subcategoria que traz as concepções sobre o “desenvolvimento de novas formas de explicação”. Essa concepção foi observada principalmente na discussão sobre o que é descoberta científica, ou que descoberta os entrevistados pretendem fazer na sua pesquisa. Nas falas seguintes, evidencia-se que a ampliação das teorias químicas se baseia no aprimoramento e complementação, características que não proporcionam a “falsificação” (no sentido popperiano) dessas teorias, o que embasa também a escolha de teorias devido a circunstâncias (e não por sua universalidade).

QA2: *busco... busco propor algum mecanismo... como que ocorre a passagem de compostos através da camada lipídica... isso pode ser utilizado para o desenvolvimento de novos fármacos... por exemplo*

QBQ1: *(...)((a proteína)) ajudava a célula a se dividir e por isso ela tava lá... era um acessório importante... e eu modifiquei essa proteína... com intuito de aumentar a concentração dela dentro da célula e dê o efeito dela ajudar a célula a se dividir mais ainda... só que o que eu observei foi o*

contrário... ela começou a prejudicar a divisão... ela não deixava a célula a se dividir... então foi uma descoberta pra mim... inesperada... ela tinha duas condições... ela podia ajudar e pra atrapalhar... ela tinha dois caracteres... então esse foi um tipo de coisa que meu modelo não compreendia... e eu tive que começar a inserir essa variável dentro do meu modelo/ como essa proteína... que tava modificada... ela funciona diferente... e isso ajuda entender todo o mecanismo global... é um tijolinho dentro de uma parede e depois... às vezes eu vou construo uma parede e vê que ela tá ficando torta...(...

QBQ2: (...) eu acho que tudo é uma descoberta científica... se eu tô no meu processo de extração e descubro que.. na verdade... um solvente é melhor que o outro... é uma descoberta científica... pode ser a descoberta mais relevante do mundo... mas é uma descoberta científica... a medida que vai me ajudar a prosseguir na minha ciência... à medida que se eu ficasse presa no outro solvente... eu não ia conseguir resultados tão bons... enfim/ então... de certa forma... todo pequeno passo que você dá... eu acho... na sua pesquisa... é uma descoberta científica/ (...)

QI1: algo que traga alguma novidade pra alguma área que já estava sendo desenvolvida... não necessariamente algo que vai revolucionar o mundo... mas por exemplo... AH/ eu descobri que tem uma molécula que ela é antioxidante... mas depende né? num nível tal é oxidante... mas em outro ela pode fazer mal... então isso é uma descoberta né? é o passo a passo da ciência... todo dia a gente dá um passinho pra frente

QO2: (...) esse tipo de pesquisa ((artigo sobre mecanismos de reações orgânicas))... sempre vai ter informações... qualquer coisinha que se faz diferente é algo que se pode publicar

QF2: o químico trabalha o estudo das transformações da matéria né? como produzir novos produtos e como entender como esses produtos interagem com o meio e com outros produtos químicos

A percepção dos doutorandos vai ao encontro das discussões de Schummer (2010, 1997a, 1997b e 1997c), Berson (2008) e Vemulapalli (2008), os quais assinalam que a teoria química é acumulativa, pois se centra na síntese de novos produtos químicos (como

produzi-los, identificá-los e mapear suas propriedades). Quando vem à tona um imprevisto experimental, o químico faz correções, acrescentando mais elementos à teoria. Nessa perspectiva, a teoria química está sempre se aprimorando e se reformulando, não havendo muita atenção para as fragilidades das teorias desde que elas sejam úteis para o que os químicos queiram explicar ou prever (Berson, 2008; Schummer, 2010, 1997a, 1997b, 1997c; Vemulapalli, 2008).

A forma como o conhecimento químico expande implica, assim, no significado de descoberta científica que, neste caso, não acarreta grandes mudanças na área. A partir disso podemos ter algum entendimento sobre o que é descoberta científica na química para os entrevistados. Descoberta científica poderia ser entendida como “revelar à vista algo que já existe”. Mas isso pressupõe a crença de que algo existe *a priori*, ou seja, independente da existência do ser humano, e que também pode ser enxergado, retirando-se a “capa” que o cobre. Esse entendimento não se assemelha às descobertas mais comuns na química, que em geral consistem na criação de substâncias ou materiais antes não encontrados na Natureza. Outra concepção de descoberta pode ser a de invenção. Invenção pode significar criação ideal, ficção; ou, o que se assemelha mais com as descobertas na química, criar ou pôr em prática as ideias, pois as invenções na química tornam-se existentes, quer se veja sob o viés do realismo científico (as moléculas sintetizadas passam a existir), quer sob o ponto de vista de produção de substâncias novas (síntese de uma nova substância). Ainda outra interpretação que pode ser dada à expressão “descoberta científica” seria a constatação de um evento anômalo que não era previsto pela teoria antes vigente, fazendo com que crenças e procedimentos, antes tidos como certos, possam ser descartados e substituídos. Essa última interpretação também não contempla grande parte do desenvolvimento da química, considerado sob a perspectiva do crescimento das teorias químicas como uma colcha de retalhos, conforme sugerido por Schummer (2010). Mesmo quando um doutorando associa uma descoberta na química com uma revolução, percebe-se que essa revolução está mais relacionada com a disseminação e a utilização do conhecimento, como explicitado no exemplo seguinte:

QO1: (...) essa descoberta... no caso... ela tem o impacto talvez maior... porque a tabela periódica é uma linguagem que todos os químicos utilizam então essa é uma descoberta científica... de grande impacto... agora... o que eu tô vendo aqui ((artigo sobre mecanismos de reações orgânicas))... esse tipo de descoberta é mais restrita pra determinadas áreas... entendeu? tá vendo? paládio... metal de transição... metal pesado... então talvez esse daí... essa descoberta é importante e tal... claro/ mas talvez é mais interessante pra alguém que trabalha com isso... entendeu?

Lemes: mas como você definiria descoberta? a partir das duas notícias...

QO1: descoberta... você... é encontrar algo novo... algo novo e que seja... que revolucione a ciência... que revolucione tudo aquilo que foi estudado

Assim, a teoria química pode ser entendida como acumulativa, mas não linear, pois a questão da utilidade de uma teoria em certo momento, para a explicação de certos fenômenos ou para o desenvolvimento de aplicações, dá origem a deformidades não lineares quando se olha o decorrer do processo de incorporação das teorias ao corpo de conhecimentos da química. Isso é decorrência dos “remendos” necessários para a teoria continuar sendo útil. Desse modo, quando se ensina o desenvolvimento do conhecimento químico na ausência de contextos, e de forma rígida e linear, pode-se aumentar a dificuldade dos aprendizes em entender integralmente como funciona essa ciência.

3.1.1.d. Interfaces com outras ciências

Outro aspecto externo às teorias da química está relacionado à subcategoria “interfaces com outras ciências”. Essa característica aflorou majoritariamente na segunda atividade do terceiro bloco, que continha fragmentos de textos sobre o reducionismo. Quando os pós-graduandos não conheciam essa temática (somente QBQ2 conhecia o debate sobre o reducionismo), os sujeitos relacionavam as citações com o tema da interdisciplinaridade. Isso é explicitado nas falas a seguir:

QA1: essa aqui no sentido de que não existe fronteiras ((apontando para o trecho de Oparin))... e é onde tá caminhando... nesse sentido mesmo... e essa aqui em termos de interdisciplinaridade ((apontando para o trecho de Heitler))... que a coisa não tá mais só em estudar por estudar... coisas separadas... nesse sentido

QI1: eu acho importante essa ideia aqui... pelo menos nesses dois está mais explicito...três últimos exemplos... a ideia de relacionamento entre toda a ciência... eu sou químico bioinorgânico... mas e daí? eu tenho que saber físico-química... tenho que saber orgânica... tenho que saber bioquímica... tenho que saber física... matemática então acho que não dá pra separar em classes assim... então eu sou isso e só sei disso/ não vou saber de mais nada/ então aqui fica bem claro quando ele fala que a química e a física se fundiram... então é isso

QO2: e eu acho também essa questão de química e física((se referindo ao trecho de Heitler))... apesar de eu não gostar muito de física... mas isso é uma verdade... que a química e a física sempre andam lado a lado... mais do que com outras áreas do conhecimento...

QI2: (...) analisando isso aqui ((os trechos))... eu acho que antigamente... a ciência era uma coisa só... eu acho né? e depois teve essa divisão... agora eles viram que não... realmente as coisas estão um pouco interligadas né? porque hoje em dia... o próprio químico que faz síntese... a parte de RMN e infravermelho... são métodos físicos... chamam métodos físicos aplicados na química né? mas geralmente um entendimento aprofundado da técnica é mais é pra um físico né? aí o físico tem entendimento das equações... mais matemático... a questão da matemática aplicada... eu acho que tá tudo mais ou menos interligado né? a química... a física né?(...)

As respostas sugerem que as visões reducionistas, expressas nos fragmentos de textos apresentados aos entrevistados, podem ser interpretadas também como valorização da interdisciplinaridade, o que vai ao encontro da tese que Schummer defende em seu artigo de 2003a. Nesse trabalho, Schummer examina casos históricos rotulados como reducionistas – redução das ciências biológicas e médicas à química – e conclui que a perspectiva fisicalista influenciou a interpretação dos casos como sendo redução e não como interdisciplinaridade. Com isso, entende-se que a química tem aspectos que se conectam com a física, a biologia e outras ciências.

Schummer (1998, 1997d) tenta entender como funciona essa relação com a física. Em artigo de 1998, ele explicita que a química quântica está localizada em uma área de

interface com a física, sendo essa distante do núcleo das teorias químicas, que ele considera ser centrado nas propriedades das substâncias químicas. Em outro trabalho (Schummer, 1997d), na tentativa de entender a físico-química, Schummer alega que os físico-químicos tratam os problemas químicos aplicando conceitos, métodos e instrumentos físicos, por meio do pluralismo pragmático de modelos, ou seja, a físico-química não é uma área redutível, e sim de interface, mais química do que física.

Após o término da primeira entrevista, e considerando essas interpretações que apontavam para a interdisciplinaridade, logo em seguida foi esclarecido aos pós-graduandos que os excertos da última atividade eram a respeito do reducionismo, sendo, também, explicado do que se tratava esse debate. Essa explicação fez com que os doutorandos procurassem articular aspectos particulares da área química, sendo um desses, novamente, suas muitas conexões com as outras ciências.¹⁴

QBQ2: (...) não gosto dessa redução da química a física...acho que nenhum de nós acha... na verdade... concordo que a física e a química andam estupidamente conectadas...

QF1: (...) a química é muito ampla... pra ser só um ramo da física... e hoje eu acho que... em alguns pontos... elas estão muito conectadas... (...)

QF2: (...) a química se baseia nas leis da física... mas as leis da física são difíceis de aplicar à química... por causa dessa grande dificuldade de entender... de aplicar as equações a compostos maiores

QI2: (...) ((química)) é uma ciência básica também né? você pode relacionar com outras também... com biologia... com outras...

Nas falas exemplificadas, entende-se que, na tentativa de argumentar contra a posição reducionista, os doutorandos, além de reconhecer os desdobramentos que a área possibilita, distinguem a química comparando-a com outras ciências. Scerri (1991) também

¹⁴ Nas respostas a essa atividade, surgiram outros aspectos peculiares à química, que serão discutidos em outras subcategorias.

segue essa perspectiva, considerando que a física utiliza modelos matemáticos para prever os fenômenos, enquanto a química utiliza classificações baseadas em qualidades. Porém, a classificação da química é diferente da encontrada na biologia, pois a primeira não só ajuda a química a organizar seus objetos, mas também ajuda a prever a existência de novas substâncias.

Em vários momentos das entrevistas, os químicos investigados também expressaram, como característica da química, a posição de ciência central, mas sempre com a intenção de enfatizar suas diferenças em relação a outras áreas.

- **Quando foi perguntado o que o químico faz:**

QA2: *é... aqui ((na química)) você tem o diferencial que você pode ver todos os lados... a gente pode pegar vários problemas que tem na física e na biologia -- que eles não conseguem resolver -- e a gente consegue contornar alguns problemas que tem na parte de síntese... parte de análise.... essa característica multidisciplinar né?*

QO2: *(...) então químico é isso... lida com substâncias ... obviamente hoje tem as áreas ditas de interface né? você não fica mais só naquele seu conhecimento né? (...)*

QI2: *eu acho que é diferente porque a química estuda os compostos químicos... as propriedades dos materiais... o físico também estuda isso aí... eu acho um pouco difícil de definir... porque hoje tá tão relacionado... esse cruzamento de áreas que fica um pouco difícil de especificar o que que químico... porque lá também tem... no meu laboratório... tem gente formada em farmácia... ciências moleculares... não tem muito que... e faz doutorado em inorgânica... não tem muito o que dizer o que o químico faz... é difícil por que hoje é amplo né?*

- **O motivo da escolha da química como graduação:**

QBQ1: *então... eu sempre gostei da visão molecular... de mecanismos moleculares que a ciência mostrava... e eu sempre gostei disso relacionada a como as coisas vivas funcionavam... então na verdade eu escolhi química... porque eu achava que era o curso que ia me ensinar como enxergar e entender as moléculas... e eu escolhi o Instituto de Química aqui porque tinha um departamento de bioquímica muito forte já... (...) já era meu interesse estudar química dentro da biologia*

QBQ2: (...) eu gostava de genética também... e aí meu professor de biologia falou que pela química eu podia ir pra genética... porque eu tava achando que... por todos esses lugares que eu fosse... eu ia ter uma falta de números... porque eu sou uma pessoa de exatas... querendo ou não... biologia tem pouco número... e ele falou que pela química eu podia ir... (...)

- **Quando descreveram um desenho para simbolizar seu laboratório ou grupo de pesquisa:**

QO1: vou explicar... nosso laboratório mexe com biomateriais poliméricos... então eu pensei em um símbolo de um ser humano... tipo o homem virtruviano... com alguma coisa assim do símbolo da química... algo nesse sentido... que misture a química com a parte da área médica... que é nosso trabalho a gente faz polímeros pra área médica

QBQ2: teria que ser uma alga... com certeza... uma macroalga né? que são as algas visíveis... porque uma micro nem tem graça direito... embora eu trabalhe com elas... vistoso não é né? então tem que ser uma macroalga... eu não sei... dentro de uma gota para simbolizar extração... eu não sei direito... puxa/ eu nunca pensei nisso/

QI1: pra nossa área... seria a hemoglobina... ela tem o que a gente quer... tem a parte biológica ali... mas ela só funciona porque tem um ferro lá dentro.... ela tem um metal... no estado de oxidação dele lá... então... acho que seria um símbolo...

Observa-se, portanto, que a maioria dos pós-graduandos tem a concepção de que a área de atuação da química, por causa da possibilidade de relacionamento com diversificados campos de trabalho, aplicações e relacionamentos com outras áreas, traz vantagens, desperta interesses, sendo um dos aspectos que a diferencia das outras ciências. No tocante à diferenciação, no entanto, a pós-graduanda QA1, chama a atenção de que há certa redução da química à física, mesmo que ela não simpatize com a ideia:

Lemes: (...) na sua opinião... você acha que se a física não avançar a química também não avança?

QA1: pensando nesse lado não... eu concordo que ela ((a química)) avança independente...

Lemes: se falar que todos esses cálculos estão errados... vai fazer alguma diferença na química?

QA1: *mas por outro lado... eu acho que ela avança porque existe uma base muito sólida da física... eu acho que se não tivesse a física... e toda essa parte da mecânica quântica... a química não teria evoluído... então por isso que eles defendem a sub-área... não que me agrada falar isso... não me agrada falar isso... mas eu acho que tenho que concordar... hoje ela sobrevive sem a física... mas nos primórdios não... se nos primórdios ela dependeu da física eu acredito que ela pode ser considerada uma sub-área... (...)*

Fica evidenciado, nessa fala, o que Scerri (2007a) defende como sendo a redução epistemológica da química à física. Scerri reconhece que a física quântica forneceu parâmetros quantitativos importantes para corpo de conhecimento das sub-áreas da química. No entanto, ele argumenta que a química não é reduzida ontologicamente, pois o tratamento sobre os fenômenos difere daquele feito pelos físicos. A química leva em consideração a existência da singularidade em conjuntos complexos – diferentemente da física, que coloca importância nas partes de onde se deduzem as propriedades do todo. Labarca e Lombardi (2005) acrescentam que o estatuto ontológico também é diferente quanto à postura mais realista dos químicos em relação às entidades. Assim, mesmo que os químicos utilizem as teorias dos físicos, a maneira como eles encaram as entidades que derivam das teorias é diferente.

A discussão reducionista evidencia, contudo, a forte relação entre aspectos internos e externos das teorias químicas. A separação entre esses aspectos é um pouco tênue, pois as características externas às teorias químicas influenciam as internas, e vice-versa. Devido a isso, entende-se que as interfaces com outras ciências geram grandes possibilidades de atuação para os químicos, sendo um dos aspectos que mais estimula as pessoas a procurar essa área. Todavia, essa amplitude acarreta a inclinação a pesquisas vendáveis e à perspectiva utilitarista no ensino de química, pois as questões que orientam as pesquisas podem influenciar sobre como a química é ensinada (Schummer, 1999; Talanquer & Pollard, 2010), perpetuando essa perspectiva, e influenciando a imagem pública dessa ciência.

É possível constatar que a aplicação prática tem um grande papel na área química, uma vez que, depois de sintetizar uma nova substância e caracterizá-la, o próximo passo

seria investigar o que se pode fazer com ela. A aplicação está, portanto, relacionada com o desenvolvimento de novas formas de explicação na química, considerando que as teorias químicas se desenvolvem por meio da adição de novos resultados e interpretações. Além disso, a aplicação também encadeia uma série de desdobramentos em outras ciências, ditas de interface. Em contrapartida, esse relacionamento facilitado com outras ciências pode ser entendido de maneira depreciativa pela perspectiva reducionista. Esta perspectiva pode ser aceita em parte, mas não no âmbito ontológico, o qual será o ponto de partida para discutir o que foi evidenciado nas falas sobre a dimensão interna das teorias químicas.

3.1.2. Características do pensamento químico

A categoria “características do pensamento químico” abrange peculiaridades internas das teorias químicas, enfatizando as manifestações sobre como essas teorias funcionam. As subcategorias seguintes expressam, mais detalhadamente, a percepção dos sujeitos sobre organização, estrutura e papel das evidências experimentais e entidades explicativas no conhecimento químico. No que tange às entidades químicas, os dez químicos entrevistados têm presente em suas falas a concepção realista das entidades e teorias químicas. No entanto, para entender de uma forma mais detalhada, e escrutinar qual o papel do “realismo químico” no conhecimento químico, criamos duas subcategorias que representam dois diferentes níveis de concepção realista entre os químicos. Essas duas subcategorias, então, explicitam aspectos ontológicos do mundo químico.

3.1.2.a. Realismo químico com referência a imagens

As falas que mostravam confiança quanto à existência de entidades como átomos, ligações, etc., e eram associadas a uma forma ou imagem para essas entidades, foram alocadas na subcategoria “realismo químico com referência a imagens”. Essas falas estavam presentes, basicamente, no primeiro conjunto de entrevistas, quando se estava investigando sobre qual a atividade mais comum feita pelos químicos; quando se questionou

o significado de um espectro de infravermelho; e quando se questionou sobre a possibilidade de se “ver” orbitais.

Quando os sujeitos explicavam a relação entre o espectro de infravermelho, as tabelas de atribuição de frequências e a representação da molécula, eles deixavam explícita a grande contribuição da técnica de infravermelho ao realismo químico, principalmente para a confiança na realidade das formas das estruturas moleculares. Exemplo de uma concepção típica manifestada pelos entrevistados é que a radiação incidente aumenta as vibrações (estiramentos e deformações) das ligações químicas existentes em uma molécula. As moléculas, então, têm estrutura de uma determinada forma; suas ligações vibram, podendo ser detectadas pela variação de absorção da radiação por essas movimentações, que são interpretadas pela correspondência entre o grupo funcional da molécula, as possibilidades de deformações e estiramentos e a absorção da radiação. Essa correspondência é consultada em um banco de dados onde se encontram outras medições feitas em compostos cuja estrutura já é conhecida, ou seja, é feita uma correlação direta entre um grupo funcional existente na molécula e uma dada absorção na faixa espectral.

QA1: *é... na verdade... o que eu penso... sem analisar nada especificamente... esse aqui ((tabela)) caracteriza cada pico né? e juntando essas informações você chega na molécula*

Lemes: *isso é uma evidência experimental? o que o infravermelho te dá?*

QA1: *na verdade é um quebra-cabeça né? cada pico você obtém um estiramento... e você consegue por meio desse estiramento... várias peças do quebra-cabeça e vai juntando uma à outra até chegar na figura desejada....*

QA2: *através de teoria de orbitais moleculares você pode estar explicando certa rigidez que uma ligação tem... se ela é sujeita a rotações... estiramentos ou ela é uma coisa mais rígida... se pegar um carbono é bem mais simples né? pode ter ligações simples... onde a todo momento você pode ter rotação nos dois carbonos... por exemplo o etano... quando você tem o eteno ou o etino... você já tem uma certa... impedimento pra ocorrer essas vibrações... então na verdade você está falando de orbitais pi... pi e sigma... então... dá pra explicar os dois... (...)*

QBQ1: (...) cada um desses grupos na molécula... eles vão ter uma transmitância... (..) se você conhece quais são os picos que emite essa transmitância e uma tabela... você vai poder saber que cada pico desse corresponde a um ambiente químico dentro dessa molécula... então você vai saber que um pico tá relacionado a uma carbonila em um mesmo carbono... se a carbonila tá ligada a um hidrogênio

QBQ2: ela ((a técnica de infravermelho)) me dá de informação das vibrações das ligações de cada átomo... aliás... entre cada átomo... a vibração e de certa forma o movimento que elas fazem... aí dá pra discernir o estiramento da deformação...

QO1: geralmente a carbonila... a faixa de vibração no espectro é de mil seiscentos e oitenta e vai até mil e oitocentos... ela varia conforme o tipo de carbonila né? a carbonila de aldeído... ela tem uma frequência um pouco menor... entendeu? agora... geralmente... quando tem carbonila de éster ou então carbonila de cetona que tem metilas... grupos doadores de elétrons... doando elétrons com a carbonila... as frequências ficam um pouco maiores... então é essa relação que eu associo... nessa faixa de carbonila de carbonila de mil setecentos e dois eu realmente eu diria que é uma carbonila de um aldeído né? (...)

QO2: esse aqui é um espectro de infravermelho... um tipo de espectroscopia que nada mais é que a interação da energia com a matéria... tem vários tipos de interações... dependendo do comprimento de onda dessa energia... é um tipo de gráfico... é um tipo de interação e esse é específico do infravermelho... então basicamente é o que esse comprimento de onda... o que essa energia do infravermelho consegue fazer na molécula... o que ele consegue é as mudanças em estiramento... aumenta a distancia da ligação... diminui... girar a molécula... e essas coisas é colocada na forma de um gráfico...(..)

Essas falas expressam, então, a materialidade do modelo de entidades teoricamente abstratas (átomo e ligação química) e sua relação com as evidências produzidas pelo infravermelho. Essa relação direta é examinada por Schummer (2002), quando discute o advento dos instrumentos na identificação das substâncias. Schummer argumenta que os dados dos instrumentos repercutiram no nível ontológico da química, pois se passou a

acreditar que existe exatamente uma estrutura química característica para cada substância química. Assim, os químicos parecem dar menos importância ao processo de identificação das espécies químicas pelo exame dos efeitos provocados sobre propriedades essenciais (ponto de fusão, por exemplo) na interação entre substâncias, para uma grande confiança no nível “teórico”. Neste caso, entende-se que a ontologia da química hoje considera não que as substâncias interagem com a radiação produzindo evidências sobre as suas estruturas moleculares; mas sim que as substâncias interagem com a radiação, por causa de suas formas moleculares. Sendo assim, para o grupo de químicos investigados, a estrutura da molécula precede a propriedade, a evidência. Nas falas dos doutorandos, não é colocada em discussão a existência da carbonila, sua forma e suas vibrações; o objetivo do infravermelho é ver se na molécula existe uma carbonila, que estará numa faixa espectral factual. Essa evidência de mudança no entendimento ontológico da relação teoria evidência também foi encontrada na análise dos livros didáticos de química geral para ensino superior utilizados na década de 90 (Souza, 2012), o que reforça essa tendência realista nos químicos.

Analisando as falas dos químicos investigados, percebe-se a grande influência da incorporação dos métodos espectroscópicos sobre as “certezas” dos químicos, como argumenta Del Re (1998; 2000). Francoeur (2000), porém, ressalta que os modelos dos químicos não têm materialidade definitiva, pois são submetidos a vários exames e manipulações pelos químicos. Mas isso, como discutido no item 3.1.1.c., não é visto como anomalia pelos químicos, que concebem, com naturalidade (mas não podemos afirmar se com consciência), a necessidade de contínuos ajustes e acréscimos em suas teorias e nos modelos que as representam.

Outro possível motivo para a confiança nessa realidade imagética química é a relação, não só com o infravermelho, mas com todos os instrumentos utilizados pelos químicos, como é expresso por Burewicz e Miranowics (2003). As representações mais icônicas expressam de forma mais “completa” – e até mesmo realística – as entidades teóricas, se comparadas às representações predominantemente simbólicas – mais

associadas às convenções químicas, que captam a composição e não tanto a forma (como a estrutura molecular) (Grosholz & Hoffmann, 2000). Assim, as representações mais icônicas podem ter contribuído para a formação dessa concepção realista entre os químicos investigados.

Essa concepção pode ser reflexo, também, da confusão ou mescla do que seriam *fatos, interpretações e representações na química* (Souza & Porto, 2011, 2012; Talanquer, 2011b). Todavia, para o “fazer química”, tendo em mente as falas dos entrevistados, essa vertente filosófica realista, mesmo que não consciente, não constitui obstáculo para o grande volume de produção e desenvolvimento da área da química. Assim, o “fazer química” e o “ensinar química” necessitam de aportes filosóficos diferentes. Para “fazer química”, pode-se ser realista, acreditar na correspondência da representação/modelo com o objeto real, sem que haja prejuízo para os objetivos pretendidos. Para “ensinar química”, em contrapartida, admite-se a necessidade de maior reflexão sobre diferentes posicionamentos filosóficos, para que os alunos sejam apresentados às controvérsias sobre o tema, e sejam explicitados os prós e contras de cada vertente. A imposição da perspectiva realista para o aluno do ensino médio, por exemplo, pode afastá-lo da química, por não conseguir compreender a direta correspondência entre teoria, modelo, representação e evidência experimental. Para o estudante, muitas vezes não faz sentido aquilo que, para o professor, está estabelecido e não sujeito a discussões.

Nessa perspectiva, Bucat e Mocerino (2009) destacam também que, se as representações no papel forem ensinadas (tanto no ensino médio, quanto no ensino superior) como sendo a descrição direta do real (seguindo uma perspectiva realista imagética), os alunos podem operar sobre as representações no papel, em vez de operarem sobre os modelos teórico-abstratos aos quais essas representações se referem. Além disso, vale considerar que a representação não abrange todas as propriedades químicas de uma vez, pois cada modelo abrange uma ou outra propriedade, ou certo conjunto de propriedades. No entanto, a postura realista em relação a imagens pode ter aspectos úteis, se for considerada sua função representativa do conceito abstrato (Zeidler, 2000).

Levando-se em consideração o diálogo com os autores acima, as possíveis explicações para a percepção realista com referência a imagens nos doutorandos estão relacionadas, principalmente, com a formação do químico, o que também se reflete nos modos como eles entendem e lidam com o conhecimento químico. O químico, então, parece ter que enfrentar uma tensão subjacente, entre o que é um símbolo e o que é um ícone, e qual o compromisso filosófico que essa escolha implica, sem ter um momento de reflexão sobre isso. A preferência por modelos mais icônicos está relacionada com uma postura realista que não diferencia representação de modelo. A escolha por modelos mais simbólicos está relacionada a uma postura mais instrumentalista, onde o símbolo é um signo que representa convencionalmente o objeto a ser estudado.

O advento da tecnologia na prática química (com as técnicas de RMN, infravermelho, espectrometria de massas) contribuiu tanto para o maior acesso a evidências não visíveis a olho nu, quanto também para o surgimento da modelagem computacional (Mainzer, 1999; Trindle, 1999). Essas duas contribuições, por sua vez, parecem convencer os químicos entrevistados sobre a realidade não apenas das entidades, mas também de sua forma, desenvolvendo um mundo ontológico próprio da química, cujas representações expressam as formas das entidades químicas como se fossem fotografias. Essa concepção é evidenciada pelas falas a seguir, que tratam dos artigos sobre a visualização de orbitais.

Q01: *bom eles utilizaram a ferramenta de raio-x ...experimento que dá dados da distribuição pra densidade eletrônica e... fizeram uma comparação dos resultados com os cálculos que eles já tinham feitos... encontrados na literatura... mais dados que eles descobriram... pra ver o espaço de um orbital ao outro... pra deduzir que o cobre tinha uma ligação... formava dois cobres ligados... dois cobres estavam ligados... na verdade eles fizeram isso pra ver como que era a ligação... ligação do composto aqui (...) pra mim isso ((orbitais)) era bastante teórico... quando a gente estuda a parte de orbitais é muito teórico e com cálculo.... com a tecnologia você pode provar a existência do orbital*

Q02: *((...)) eles fizeram vários experimentos... como difração quantitativa de elétrons em feixe convergente... raio-x... mapearam a distribuição e densidade eletrônica... tudo no sentido de observar a estrutura do óxido de cobre... e esse aqui ((lendo o trecho do artigo do *Physical Review*))... então...*

o que eu pude entender nesse trabalho é que eles desenvolveram então... uma técnica... microscopia eletrônica nada mais é do que uma técnica pra observar estruturas... superfície de moléculas e eles desenvolveram uma nova técnica pra visualizar melhor essa superfície...

QBQ2: *provavelmente eles mapearam... conseguiram mapear a distribuição eletrônica do óxido de cobre...(...) a gente tá começando conseguir ver a distribuição eletrônica que faz a gente acreditar que os átomos são daquele jeito mesmo...*

QA1: *o que ele ((o 1º fragmento do artigo sobre orbitais)) tá mostrando? pra mim... uma descoberta científica... os orbitais d já existem e ele tá mostrando isso... trazendo ao mundo... provando que isso existe... os buracos d do átomo de cobre... e também mostrando a existência da ligação desse composto... muito legal isso...*

Lemes: *e esse outro?*

QA1: *mesma coisa... a partir daquilo que já existe... consegue mostrar... provar...*

O que é percebido, explicitamente, além da evidência sobre o papel do experimento na química¹⁵, é a necessidade de expressar o modelo teórico-abstrato sobre os orbitais utilizando referências a figuras ou objetos familiares. Esse modelo de orbital, no entanto, é diferente do modelo do físico, pois este último tende ser uma descrição matemática de um estado das partículas da matéria (Mulder, 2011), portanto, sem usar imagens. De maneira semelhante ao que foi observado nas entrevistas com os pós-graduandos, Ogilvie (2011) defende que é possível medir experimentalmente as propriedades dos átomos e moléculas. No entanto, os doutorandos vão além, acreditando na existência da entidade orbital dotada de uma determinada forma, enquanto Ogilvie defende que não se pode afirmar que essa entidade existe. Os orbitais dos químicos, para esse grupo de entrevistados, parecem ser como as representações nos livros didáticos, entendidos como densidades eletrônicas.

Frente à grande ocorrência da concepção realista nas falas dos químicos na primeira entrevista, procurou-se um conhecimento mais aprofundado dessas concepções, na segunda entrevista. De maneira geral, as falas da segunda entrevista davam mais detalhes das características da perspectiva realista. Assim, os químicos entrevistados parecem estar

¹⁵ O papel do experimento na química está discutido adiante, de forma mais aprofundada, na subcategoria “Valorização das evidências experimentais”.

mais satisfeitos com os modelos que podem ser desenhados no papel, ou manipulados (como esferas, varetas e molas), corroborando os argumentos de Caldin (2002).

Lemes: *então pra gente considerar que tem estiramento... a gente tem que considerar que existem ligações químicas...*

QA1: *e que existem orbitais e que existem elétrons...*

QA2: *(...) teoria de ligação metal-metal... que tem um mar de elétrons né? então para você caracterizar você vai ver como que está espalhado esses elétrons no material*

Lemes: *pra você falar de distância de ligação... de estiramento... de interação na molécula... a gente tem que falar que a molécula existe... pra pensar nisso...*

QO2: *exato... como eu falei... você tem que ter certos conhecimentos pra tu ir formando... conhecimentos que vão envolver... tem que ver bem o que que é uma molécula... o que que é uma ligação... necessariamente você não precisa ter conhecimento de orbitais já bem claro... mas uma ligação química... o que que é... a distância entre dois átomos... que aumenta... diminui e gira...(...)*

Lemes: *o que que tudo isso representa? o que esse espectro significa?*

QI1: *ele representa os tipos de ligações e como elas estão se comportando quando elas são estimuladas pelo infravermelho... no caso... e com isso da pra saber de que forma elas estão ligadas*

QF1: *(...) o químico ele associa muito ... todo processo que ele está lidando com... sei lá... que um elétron saiu de um orbital e foi pra aquele... ou uma transição do orbital HOMO pro LUMO... entendeu?(...)*

A fala do QF1 acima se destaca por ter, além da referência à realidade e forma, a percepção de que, sendo pesquisador em química quântica teórica, ele entende que há uma outra visão, diferente da dos “químicos”. As posições dos pós-graduandos QBQ1, QBQ2 e QI2, vão além do compartilhamento da perspectiva realista imagética, incluindo também em suas falas, possíveis posições instrumentalistas¹⁶. Isso pode ser uma evidência da falta de reflexão sobre o assunto ou, dito de outro modo, falta de consciência sobre o que eles

¹⁶ O *instrumentalismo* é uma forma de anti-realismo, que considera as teorias científicas como sendo instrumentos convenientes para calcular e prever fenômenos (Popper, 1972).

próprios acreditam em relação às características do conhecimento químico. Na sequência, ilustramos esses aspectos com trechos das transcrições das primeiras entrevistas e, depois, os comentários dos pós-graduandos sobre esses trechos, na segunda entrevista.

- **1º Entrevista:**

QBQ1: (...) you tá vendo uma molécula de óxido de cobre... nada mais é... do que tirando uma série de fotos em instantes... e vendo qual a densidade de elétrons ao redor dessa molécula e conseguir diferenciar quais elétrons são provenientes de orbitais atômicos e quais são de orbitais moleculares... ou seja... são elétrons compartilhados daquela molécula... (...)

- **2º Entrevista:**

QBQ1: *depende o que você considera existir...*

Lemes: *e como você considera?*

QBQ1: *tipo... felicidade existe? tipo... alegria existe? você só vê a demonstração da alegria... demonstração da felicidade... então a gente cria um ente que a gente chama de felicidade... os átomos é a mesma coisa... a gente tem indícios e pra explicar uma lacuna do que a gente entende... pra ligar uma coisa na outra... a gente chamou uma coisinha de átomo*

Lemes: *mas então... quando a gente chamou isso de átomo... porque quando vocês colocam a amostra no infravermelho... a gente tem um modelo de interação do infravermelho com aquela matéria...*

QBQ1: *hunrum... ((concordando))*

Lemes: *... do modelo de ligação... do modelo de átomo... então é o modelo... do modelo... do modelo*

QBQ1: *sim... a partir do momento que você tem uma... se a sua interpretação daquilo corrobora com o modelo pré-existente... você assume que os dois têm conexão e um suporta o outro... (...) acontece que aquele experimento ((o experimento que utiliza raios-x)) tá te dando um feedback de que faz sentido ter uma densidade eletrônica ali/ ponto/ isso não quer dizer que com certeza existe uma densidade eletrônica naquele lugar... mas alguma coisa está se aglomerando naquele ponto e que dificulta a passagem da radiação ali... e pelas características de como essa onda está sendo perturbada... nós podemos dizer que é o que a gente chama de elétron ou não...*

- **1º Entrevista:**

QBQ2: (...) então a gente tem que ter fé... tem que acreditar que o átomo é daquela maneira... é um tanto de fé e um tanto de abstração... se você conseguir pensar aquilo direitinho e pensar que isso realmente pode acontecer ou... a minha visualização três-D é horrível... então pega aqueles complexos que são assim e assado... e você fica com as canetas fazendo assim e assim... então eu acho que a capacidade de abstração é muito importante...

- **2º Entrevista:**

((Trecho escrito por QBQ2 a partir de palavras retiradas da transcrição da sua primeira entrevista:))

“Química é uma questão de **fé**. Pelas técnicas que dispomos atualmente, ainda não é possível ‘ver’ um **átomo** ou uma **molécula** da maneira que gostaríamos – ou seja, como se estivéssemos vendo

uma célula, apenas olhando no microscópio. Dessa forma, passa a ser necessário um tanto de **fé** e “um muito” de **raciocínio abstrato**, para aceitar e compreender coisas que “não pode ser vistas” – ponho essas aspas porque químicos dirão que elas podem ser vistas, sim! (...)”

Lemes: com essa fala... não foi só você... foi a maioria... parecia que o químico supõe/ considerando que seja real os átomos e as ligações então aí eu explico um modelo vibracional das ligações e aí eu explico o infravermelho... o que você acha... que na hora que você lida com isso... quando você está lá olhando tanto RMN... etc... o que que você pensa?

QBQ2: eu acho que... se você ficar pensando o tempo inteiro que é um modelo disso... é um modelo daquilo não sei o que... você fica louco e você não trabalha/ você precisa mesmo assumir que alguma coisa é real... tanto que eu falo... se... até o fim da minha vida... alguém chegar a conclusão que o átomo não é daquele jeito... meu mundo vai cair/ prefiro morrer antes/ por que você tem que acreditar que alguma coisa é real/ exatamente isso que você falou/ partindo do pressuposto que os átomos são assim... que eles se ligam assim... que a ligação vibra e que é assim que funciona... vamos embora decifrar esse negócio/ tem que partir de alguma coisa... pra mim tem que ser real nesse ponto

- **1º Entrevista:**

QI2: (...) eles utilizaram um método físico... difração de raio-x... e na verdade fizeram... existe um programa computacional que tenta relacionar o método físico.... eu acho que... é uma interface entre o raio-x e química computacional... pegam essas substâncias e tentam calcular... tem um programa computacional que faz essas formas de orbitais... e essas formas de orbitais também... a gente tá acostumado com essas formas que aparecem... mas é para o átomo de hidrogênio... para outros... que têm mais elétrons... não tem aquela forma que a gente tá acostumado... (...) porque até então... essas formas dos orbitais eram muito teórico... não sei se agora tem um equipamento que pode realmente enxergar aquela forma... têm algumas técnicas de espectroscopia AFM de força atômica... que a agulha chega ser tão fina... da dimensão de alguns átomos assim... então você consegue mexer... você consegue escrever um nome... mover átomos/ escrever uma letra com átomos com essa microscopia de força atômica aí...mas eu não conheço bem a técnica...

- **2º Entrevista:**

QI2: existe ((orbital)) e por isso que a molécula... por causa dessa forma... por isso que a molécula tem ... um metano é tetraedro... se não... se fosse circular poderia ser de qualquer jeito ali né? uma forma pentagonal... pirâmide de base quadrada... aquelas formas de geometria molecular...

Uma hipótese, que pode explicar essa dualidade de perspectivas em uma mesma pessoa, é a de que existe conflito entre a formação do pós-graduando como pesquisador, ou seja, produtor de conhecimento químico; e a formação inicial do químico, que somente é apresentado ao conhecimento livresco – o qual não corresponde ao que o químico realmente faz. Além disso, pode-se apontar para a falta de espaços formais para a reflexão sobre como a química funciona (Earley, 2004; Erduran, 2005; Justi & Gilbert, 2002;

Goedhart, 2007). Essa lacuna pode dificultar a necessária transição do estudante de química, das perspectivas de “aprender química” (graduação) para o “fazer química” da iniciação científica e, depois, na pós-graduação.

Assim, no curso de graduação em química, os estudantes podem ser apresentados à concepção de que os orbitais não são reais, são simplesmente funções de onda, e são modelos construídos no mundo das ideias. Porém, como ressalta Hoffmann (2007), a manipulação das transformações químicas (no caso dos sujeitos aqui participantes, o seu dia-a-dia como pesquisador, o fazer química) contribui para o realismo dos químicos, com ou sem referência a imagens, e para outros aspectos que serão descritos e discutidos nas subcategorias subsequentes.

A postura filosófica realista imagética, abordada nesta categoria, pode trazer benefícios para a pesquisa em química – atividade na qual os protagonistas são “fluentes” em química. Todavia, para os iniciantes em química, o ensino impregnado dessa postura, desacompanhado de reflexões a respeito, pode gerar confusões e, assim, concepções inadequadas sobre o papel e a manipulação das entidades e representações na química. Outra posição filosófica para quem faz química será expressa pela próxima categoria, que caracteriza uma moderação do realismo químico, ou até mesmo se constitui em mais indícios da falta de reflexão sobre o tema.

3.1.2.b. Realismo químico sem referência a imagens

As falas que caracterizam o “realismo químico sem referência a imagens” destacam a existência real de átomos ou ligações, mas não fazem afirmações quanto a suas formas. Houve a necessidade de criar essa subcategoria, pois se observou trechos de falas que explicitavam certeza sobre a realidade somente da ideia da entidade teórica, mas não quanto a sua forma ou à possibilidade de acesso a sua forma. Somente algumas falas de QA2, QF1, QF2 e QI1 preencheram essa subcategoria, mas eles também manifestaram, em outros momentos, concepções do realismo com referência a imagens.

QF2: só não tô vendo essa ligação/ mas essa ligação existe...

Lemes: (...) você tá considerando que molécula e ligação existe... não?

QI1: sim... as moléculas são ligadas... elas interagem... a gente chama de interação de ligação

Lemes: tá... mas aí a gente não consegue ver o átomo? se ela existe... porque a gente não consegue ver o átomo?

QI1: por que a gente não chegou... tem uma limitação ótica... na física... que a gente não consegue enxergar tão pequeno assim... pra visualizar... mas acontece interações eletrônicas entre os elétrons... a mesma coisa... a gente não consegue enxergar uma corrente elétrica passando no fio... num microscópico...mas sabe que ela existe....

QF1: não quis dizer que eu não acredito no modelo molecular ((explicando seu posicionamento no trecho da transcrição da sua 1ª entrevista))... sim/ eu acredito/ até pela minha formação de químico... eu aprendi a teoria que explica os modelos moleculares né? de estrutura... porque assim... a gente aprende de uma forma bem mais simples a descrever... por exemplo... a geometria das moléculas né? que é a teoria de repulsão do par eletrônico... aquelas coisas que a gente aprende em química geral/ e a gente tem isso como conceito... assim... só que... exatamente o que eu escrevi aqui... pra mim... no meu ponto de vista... estrutura molecular é um conceito muito mais amplo... ou seja... é o arranjo de átomos que tal molécula adquire que ela que fique mais... digamos assim... confortável/ que quer dizer que tem a menor energia... que seja mais estável/ pra mim esse é o conceito de estrutura molecular/ claro/ esse é um conceito mais... correto... e aquelas teorias que a gente aprende nos primeiros anos são mais simples... mas eu conheço muitos casos que fogem a regra... aquele tipo de regra... por isso que eu tenho esse conceito mais... estrutura molecular é isso/ arranjo de átomos que a molécula adquire para minimizar essa energia né? chegar no fundo do poço

(...)

QF1: (...) não é que orbital não existe... tem muita gente que fala ... AH/ orbital não existe... existe/ claro que existe ((o orbital))... só que é um conceito muito complexo... é difícil... até pra gente que tá aqui na pós-graduação... acho que é muito complexo...

A linguagem química, que medeia as evidências experimentais e nossas interpretações, possibilitou a síntese de uma vasta gama de novas substâncias. Houve também um refinamento do corpo teórico que sustenta essa linguagem, dando dinamicidade às representações (Tontini, 1999). Sob essa perspectiva, justifica-se a crença no conceito por trás dessa representação, e nem tanto em relação a sua forma, pois elas são incertas e modificáveis. Essa percepção vai ao encontro do pluralismo ontológico proposto por Labarca e Lombardi (2005), mas, no caso do grupo estudado, além de existir uma postura realista quanto ao orbital, há também a crença realista em relação a outras entidades teóricas da química, caracterizando um “realismo químico”.

As ligações químicas são centrais para explicar propriedades e transformações químicas. Conforme salientado pelos doutorandos, as ligações químicas também possuem propriedades mensuráveis (força da ligação, vibração da ligação, etc.). Assim, de forma análoga ao argumento de Scerri (2005) – pelo qual ele considera que, se os elementos químicos são portadores de propriedades reais, eles são reais – pode-se justificar que, se as ligações químicas têm propriedades reais, elas e todas as entidades que são dependentes delas são reais.

As evidências experimentais, mediadas ou não por instrumentos, corroboram essa perspectiva realista. Entretanto, o realismo pode constituir obstáculo para o ensino/aprendizagem e para o desenvolvimento da química. Laszlo (1998, 2000 e 2002) adverte sobre o realismo ingênuo diante das pesquisas químicas, no sentido de desmaterializar – descartar as propriedades imediatas em favor das propriedades mediadas – e destemporalizar – considerar o objeto molecular estático e rígido, apagando a dimensão do tempo – o conhecimento químico. No entanto, o papel operacional que a postura realista proporciona para os químicos, reforçado pela síntese de substâncias e materiais e pelo uso de equipamentos de caracterização estrutural, tem contribuído para o desenvolvimento da área, podendo ser admissível a necessidade dessa postura pelos químicos (Zeidler, 2000).

No ensino, a perspectiva realista pode gerar alguns problemas: por exemplo, quando propriedades macroscópicas são estendidas às entidades teóricas, gerando concepções alternativas acerca do modelo corpuscular da matéria (Pozo & Crespo, 2009). Não obstante, a concepção de que trata a presente subcategoria parece ser menos ingênua, pois não se apega a formatos, que a da subcategoria anterior (realista imagética). Ainda assim, o realismo sem referência a imagens pode dificultar a manipulação das entidades teórico/abstratas que são mais bem compreendidos se os seus modelos forem materializados, como no caso da explicação sobre um impedimento estérico em um mecanismo de reação.

Uma comparação dos dados obtidos nesta dissertação com os dados de uma investigação sobre o conceito de orbital nos livros de química geral de ensino superior

(Rozentaliski, Lemes e Porto, 2012) sugere que há uma interpretação peculiar dos químicos para o conceito de orbital, um “orbital dos químicos”. O trabalho de Rozentaliski e colaboradores fornece outros indícios de que a formação do químico influencia muito na sua perspectiva filosófica. Os livros usados na formação inicial amparam tanto uma perspectiva realista imagética quanto não imagética, o que provavelmente influencia na ambiguidade de concepções acerca das entidades da química.

O papel da experimentação na formação do realismo químico é crucial, pois o resultado do experimento – do qual derivam as teorias – é um aspecto do mundo real (Vihalemm, 2011). As representações de modelos reforçam a dinamização do fazer da química, isto é, a interação entre as evidências experimentais e as teorias (Knight 2003). No entanto, não se pode deixar de lado a consciência da operação sobre compostos e sobre representações, pois ambas têm suas limitações (Jacob, 2001).

3.1.2.c. Valorização das evidências experimentais

A subcategoria para as falas que manifestaram o aspecto experimental é a “valorização das evidências experimentais”. Nessa subcategoria, chama-se a atenção para uma característica apontada pelos químicos, que perpassa outras subcategorias e é analisada aqui de forma mais detalhada. A importância atribuída ao aspecto experimental na química, tanto nos seus resultados experimentais e evidências, quanto no seu papel como ferramenta, aflorou majoritariamente nas falas dos doutorandos nos seguintes momentos: ao explicarem o que é característico do fazer químico; ao diferenciarem a química de outras ciências; ao descreverem um símbolo para o seu laboratório ou grupo de pesquisa; e ao contarem sobre as razões da escolha da química como curso de graduação, ou da área de pesquisa do doutorado.

QBQ1: (...) ((o químico consegue)) *ser mais ágil na hora de você improvisar... por exemplo... você tá usando um tipo de solvente em um experimento... só que esse solvente não está funcionando tão bem quanto você imaginou... (...) na hora que você vai querer mudar... esse experimento... você tem que ter uma noção de conceitos químicos muito bom... por que vamos mudar uma acetanitrila por um*

metanol... (...) se eu mudar eu vou ter que aditivar essa mediação com o quê... pra poder aumentar a polaridade ou não? (...)

QA1: *AH/ estudar as moléculas em si né ? acho que de todas as sub-áreas da química... o que elas têm em comum é estudar o comportamento químico das moléculas... eu acho que mais específico que isso não tem...*

QA2: *acho que... tem a conexão entre a teórica e a experimental né? só que... nem tudo que é proposto teoricamente... funciona experimentalmente... é isso que eu acho que diferencia ((a química da física))...*

Lemes: *então você acha que a química... o diferencial dela é a parte experimental?*

QA2: *a parte empírica da coisa... você faz e depois você tenta achar um modelo pra que aquilo lá corresponda ou seja... aproxime com o que você obteve nos dados experimentais né? mas muita gente defende que através de um cálculo você pode chegar... calculou então é possível... você vai e faz aquela reação que conduz a determinado composto... mas dependendo das condições... vai demorar dez mil anos pra funcionar... então eu acho que mais isso influencia mesmo...*

QO2: *químico trabalha com substâncias... independente da área... é sempre interação da matéria com alguma coisa né? (...)*

QF1: *não sei... acho que preparar solução... acho que é o mínimo que o químico deve saber fazer...*

Lemes: *mas você... na sua área de simulação... você faz soluções?*

QF1: *não... a gente ((químicos teóricos)) não faz nada... não pega e não entra... eu não ponho a mão na massa desde dois mil e cinco...*

QF2: *o químico trabalha o estudo das transformações da matéria né? como produzir novos produtos e como entender como esses produtos interagem com o meio e com outros produtos químicos*

Ao explicitar o que é único na química, os químicos consideram que a experimentação é importante, caracterizando-a não como teste de teorias, mas sim como ferramentas para explorar o novo, em consonância com Schummer (2004). Considerando ainda a análise das falas dos pós-graduandos sobre o experimento na química de forma geral, entende-se também que os experimentos são “conhecimentos-ação” para a manipulação da matéria, gerando subsídios para construir novas ideias de como formar o novo. Executando seu experimento, o químico “age” sobre a matéria para extrair mais propriedades dessa matéria e extrapolar essas informações, sintetizando o novo. Essa

leitura se aproxima das falas de alguns filósofos da química (Lefèvre, 2011; Schummer, 1997b, 1997c, 2004).

O pós-graduando QA2 coloca em evidência a diferença experimental entre a química e a física. Para ele, na física normalmente a teoria precede a formulação de fenômenos, diferentemente da química. Esse raciocínio se assemelha à proposição de Cerruti (1998), para quem a física tem o objetivo de criar fenômenos – a maioria das vezes depois da teoria –, enquanto a química tem como objetivo produzir substâncias com o auxílio de reagentes.

Nesses trechos, observa-se também o aspecto essencialmente dual da química moderna: enquanto QA1 destaca a química como estudo de moléculas – ou seja, dá ênfase ao nível submicroscópico –, QF2 e QO2 se referem ao estudo de produtos, ou substâncias – isto é, ao nível macroscópico. Além disso, QF2 aponta a criação de “novos produtos”, o que está de acordo com as perspectivas de Cerruti (1998), Lefèvre (2011) e Schummer (2004).

É interessante destacar também a fala do doutorando QF1, na qual ele expressa que, sendo a maior característica da química a experimentação, ele se sente afastado do que é química por ser um químico teórico. Essa leitura se fortalece, quando, em outro momento da primeira entrevista, ele novamente expressa o seu distanciamento em relação ao que seria essa ciência.

Lemes: *e qual a diferença entre a evidência experimental dada por essa instrumentação e se eu falar que esse benzaldeído é líquido... volátil... incolor... qual a diferença entre essas duas evidências?... tem alguma diferença?*

QF1: *não sei... aqui ((dados do infravermelho)) eu consigo visualizar melhor... acho... a molécula... se você me falar... tá aqui um benzaldeído... não sei... talvez pra quem trabalha mais ou tem mais afinidade com esse tipo de composto... se você falar ele já imagina a molécula/ agora... pra quem tá querendo descobrir ou querendo entender a estrutura molecular... com isso aqui ((dados do infravermelho)) ele já começa tem uma noção melhor... não sei...*

Lemes: *eu não tô medindo o quanto você sabe de química... fica tranquilo...*

QF1: *até porque... química... faz bastante tempo que eu não mexo...*

Nas falas sobre qual seria o símbolo que representa seu laboratório ou linha de pesquisa, QA2, QA1, QBQ2 e QF2 levaram em conta o aspecto experimental (vidrarias, equipamentos, procedimentos); enquanto QI1, QI2, QBQ1, QO1, QO2 levaram em consideração as substâncias, moléculas ou elementos químicos. Somente o QF1 remeteu a

um modelo atômico e à função de onda Ψ , indicando também uma diferença em relação aos demais entrevistados.

Além da questão experimental “necessária” para se sentir químico, QF1 ressalta também a dualidade macro/submicro, dando indícios de que os químicos têm a tendência de misturar o que é percebido empiricamente com o que está postulado por sua mente, como Laszlo (1999) defende. Essa confusão entre os níveis macro e submicroscópico pode ter sido influenciada pelo ensino tradicional da química, durante o qual não se explicita o processo de criação dos modelos e sua relação com a experimentação (Erduran, 2001).

As razões pelas quais alguns sujeitos escolheram a química como graduação e sua área de pesquisa no doutorado estão relacionadas à experimentação também, mas agora no âmbito das manipulações e evidências experimentais imediatas. Root-Bernstein (2003) já apontava que as formas, cores, cheiros e sabores estavam entre os motivos das escolhas das áreas de pesquisas pelos químicos. As falas seguintes também contribuem para a questão da valorização de parâmetros qualitativos na química.

QA2: *AH/ sempre gostei de mexer com umas coisas diferentes né? misturar algo pra ver no que dava... então em função disso mesmo...*

Lemes: *O que te atrai na inorgânica e na orgânica que não tem nos outros lugares da química?*

QO2: *eu acho que... na orgânica principalmente... é a parte do laboratório né? isso por outro lado até incomoda... porque as vezes a gente tá cansado de laboratório... mas é uma parte legal... eu acho... você aprende muito no laboratório...*

Lemes: *a parte da síntese?*

QO2: *É/ realmente você vivência a química né? sabe o que que é química... sabe que não é simplesmente... no papel é muito bonito... mas na hora da realidade é bem diferente...(...*

QBQ2: *na verdade aí entra a bioquímica e a biomol.... biologia molecular... bioquímica... eu trabalho com microlitros e etc... normal... mas tudo de biomol é dois microlitros... um microlitro... eu começava a não ficar satisfeita com a precisão das coisas... eu não sei... era tudo micro demais para eu ver... como eu acabei na área de produtos naturais... então sempre... não sei explicar... tá colorido... eu vejo que a extração tá funcionando... eu vejo o decorrer do processo me deixa mais satisfeita... na verdade/ então eu acho que foi isso que eu fui pra bioquímica...*

Os químicos parecem precisar dar sentido ao intocável mundo submicroscópico, e as evidências experimentais, principalmente as visíveis a olho nu – como ressalta QBQ2 – dão

certa segurança aos químicos. No entanto, dialogando com Treagust e Chittleborough (2001), essas evidências não revelam nada sobre o comportamento microscópico dos produtos químicos envolvidos, em um primeiro momento. Como discutido acima, o químico confunde os níveis, perdendo a consciência de qual é a relação macro/submicro, o que pode trazer prejuízos para quem está se iniciando em química. Há que se ter cautela sobre a relação entre a evidência experimental e a teoria: por exemplo, se dois compostos compartilham a mesma propriedade macroscópica de cheiro, não se pode deduzir que os dois compostos são necessariamente formados por componentes submicroscópicos idênticos (Erduran *et al.*, 2007).

Na diferenciação entre a química e as outras ciências – no terceiro bloco da primeira entrevista, sobre o reducionismo – os doutorandos ressaltam os resultados experimentais, explicitando, mais uma vez, a maneira como o químico trabalha seus dados.

QF2: (...) química é uma ciência experimental por excelência... então nós queremos resultados experimentais... a teoria é ótima... adoramos teoria... gosto muito de teoria... mas precisamos de resultados experimentais... sem eles não dá... (...)

QO1: *nem tudo ((da química é redutível a física))/ uma parte é/ eu acho que a quântica... é uma parte da química... um braço da parte da física... mas que fica na química... a física estuda mais a parte matemática... e o químico não trabalha tanto nessa parte de quântica... cálculos de Schrödinger... mas não é como os físicos estudam... então eu acho que essa parte... sim/*

Lemes: *e você acha que se mudar alguma coisa da quântica... não vai afetar nada na química?*

QO1: *depende... se for provado experimentalmente... a parte experimental é a prova....*

QI2: (...) *mas aqui na área de síntese não... até o pessoal que faz ciências moleculares aqui... a parte de laboratório de química mesmo... não viu no curso... não fez iniciação ((iniciação científica))... é complicado porque não sabe fazer nada no laboratório... o básico... assim uma filtração... você tem que estar explicando pra ele... então às vezes não vai... o próprio... a maneira como... essa primeira questão aqui da aquosidade... o próprio entendimento assim... a própria visão... do químico sobre aquele fenômeno é diferente do físico... EU acho que isso aí também tem a ver com o tipo de abordagem... como é que ele foi educado... assim na faculdade... na maneira como ele enxerga a ciência né? é a mesma coisa na educação né? assim... a pessoa tenta reproduzir aquilo que... ele tenta imaginar um professor que ele teve né? que ele considerava legal assim... mas nem sempre... aquele professor que ele achou que era bom*

Do ponto de vista educacional, a fala do pós-graduando QI2 pode estabelecer relações com o que Erduran e Duschl (2004) discutem em seu artigo. Segundo esses autores, as atividades experimentais no ensino de química no nível médio estão sendo entendidas como coleta de dados e interpretação, em vez de uma atividade por meio da qual os modelos são desenvolvidos, avaliados e revistos. Aparentemente, em algum momento do curso superior, os químicos se diferenciam dos profissionais das outras ciências da Natureza, pois incorporam um modo peculiar de pensar e agir.

Observa-se, também, que os pós-graduandos procuraram argumentar contra a posição da redução da química à física, apontando a química como sendo mais experimental, e a física mais teórica, o que está de acordo com algumas opiniões encontradas na literatura (Kovac, 2002; Scerri, 1991). Vale ressaltar que, mesmo considerando que a química também abrange aspectos quantitativos, ela relaciona esses aspectos com qualidades (mudança de cor, liberação de energia ou gás, etc.) e conceitos classificatórios (ácido, sais, etc.); enquanto muitos conceitos físicos são de natureza matemática (Erduran & Scerri, 2002), não tendo uma referência intuitiva na realidade – sendo, portanto, mais caracteristicamente “teóricos”.

No desenrolar da segunda entrevista, quando foi perguntado para o doutorando QBQ1 sua opinião sobre a inserção da matematização na química, ele explicitou a diferença entre a experimentação dos químicos, biólogos e físicos.

QBQ1: (...) então... às vezes ele ((o físico)) gera modelos... que eles não sabem se faz sentido no contexto que eles estão fazendo... é como você montar um modelo de como que a lua existiu a partir de água... mas lá não tem água na lua... entende? mas os físicos não sabem que não tem água na lua... é só uma metáfora... mas enfim... então eles falam/ AH/ essa espécie pode estar usando isso pra isso... porque essa equação tá prevendo... mas a espécie nunca teve contato com estas coisas... então é isso que o químico e o biólogo têm mais... eles têm mais o feeling da área... sabem... por experiência... por ser ciências mais experimentais... o que pode ou não acontecer/ e o físico não/ ele tem... na mente eles podem imaginar um milhão de caminhos diferentes pra chegar na mesma coisa/ só que... vai escolher um desses um milhão de caminhos... o químico não/ o químico prefere que o experimento mostre pra ele qual o caminho que aconteceu/(...)

No final da linha de raciocínio do QBQ1, ele conclui que “(...) não tem como fugir... não tem... chegou num nível de detalhe que a gente não... tem que usar física... tem que

usar matemática... só que não é igual né? (...). Ele considera que a linguagem matemática é uma linguagem universal, mesmo que a usemos de maneiras diferentes em cada ciência, mesmo não precisando utilizar orbitais para fazer sua pesquisa. Essa posição pode ser apontada como exemplo da “adaptabilidade dos químicos”, apontada por Laszlo (2006). Assim, a formação do químico, que o habitua a acompanhar e controlar transformações da matéria, pode ser extrapolada para o controle e acompanhamento de mudanças que podem ocorrer no corpo teórico e experimental da química, com o advento da “matematização”, de forma a não gerar grandes crises.

Observa-se também, na fala de QBQ1, a aproximação entre as áreas de química e biologia, e o afastamento delas em relação à física, pois tanto a química quanto a biologia levam em consideração o contexto do que está sendo estudado. A esse respeito, a consideração do contexto na química é importante não só no ambiente experimental, mas, também, como vamos ver na discussão da próxima subcategoria, na construção de suas entidades.

3.1.2.d. Caráter qualitativo e relacional entre suas entidades

A subcategoria “caráter qualitativo e relacional entre suas entidades” representa os modos pelos quais os sujeitos entrevistados entendem as evidências experimentais e trabalham com as entidades químicas. Assim, quando os entrevistados falavam sobre o que é particular ao químico; sobre as evidências mediadas por instrumentos (infravermelho e microscopia eletrônica); e sobre o reducionismo, as evidências experimentais e as entidades eram empregadas em contextos com poucas menções a números, de forma qualitativa e relacional.

QF1: (...) ((o espectro do infravermelho é)) *nada mais nada menos... que a movimentação atômica né? o modelo que explica os modos vibracionais dessa molécula...*(...)

QF2: *infravermelho é uma técnica que mede... basicamente... a frequência de vibração das ligações químicas... dá informação sobre força de ligação... e estrutura da molécula... não é a melhor técnica para determinação estrutural... mas dá uma boa ideia/(...)*

QI1: *ele ((o infravermelho)) representa os tipos de ligações e como elas estão se comportando quando elas são estimuladas pelo infravermelho... no caso... e com isso dá pra saber de que forma elas estão ligadas*

A característica qualitativa relacional entre átomos e moléculas, e entre ligações e estrutura das moléculas empregada nesses discursos, corrobora as ideias de Schummer (1997a), pois as propriedades das entidades químicas (no caso, átomos, moléculas e ligações) são classificadas por condições experimentais contextuais (a movimentação atômica em dada molécula; o comportamento de um tipo de ligação em dada molécula; etc.), e não pelo comportamento do objeto isolado, como é usualmente abordado na física. No caso da fala do QF1 acima, por exemplo, ele relaciona a movimentação atômica com a movimentação da molécula. Para Schummer (1998), o corpo de conhecimento químico se estrutura como se fosse uma rede, na qual os “nós” seriam ocupados pelas substâncias, e estes seriam ligados pelas propriedades químicas – ou seja, uma estrutura tipicamente relacional. O conceito de conhecimento como rede, empregado por Schummer, parece estar presente nas falas dos químicos. Porém, as falas também indicam que o conhecimento químico está centrado nas evidências experimentais, que revelam as propriedades. A química também se baseia em classificações que estão relacionadas a qualidades da matéria e suas transformações, como cor, cheiro, textura, etc. (Scerri, 1991). Não existe uma lei rígida que rege as entidades químicas no corpo teórico da química (Bernal & Daza, 2010; Laszlo, 1999; Stein, 2004): o ambiente químico (fatores relacionais entre os átomos e suas ligações dentro da molécula), e as condições operacionais (temperatura, interações entre solvente e substâncias, etc.), fazem variar as propriedades químicas.

O entendimento sobre a estrutura molecular – anterior à mecânica quântica, e não reduzido a ela (Hendry, 1999) – foi subsidiado pelo sucesso da síntese e caracterização de substâncias, o que influenciou o desenvolvimento de modelos que incorporaram mais propriedades. O grande rol de evidências experimentais refletiu sobre as representações desses modelos que, então, também incorporaram mais qualidades, abrangendo maior entendimento do mundo químico (Tomasi, 1999).

O advento dos orbitais para a compreensão da estrutura molecular deu mais subsídios para a construção de modelos, mas isso não significa que os orbitais foram interpretados pelos químicos da mesma forma que pelos físicos, que propuseram o conceito. O entendimento dos químicos pode ser exemplificado pela fala de QO2:

Lemes: *vamos pensar... o orgânico... quando está pensando em impedimento estérico... a gente fala... AH/ o orbital tá impedindo estericamente que reaja em tal parte da molécula.../ então é como se estivesse mesmo... existente o orbital...*

QO2: *sim... os orbitais têm lá... mas a visualização dos orbitais é que... vamos dizer... é algo ... até que muita gente nem gosta muito de estudar... exatamente por que é algo que tem que imaginar um pouco... tem que forçar a mente pra tu conseguir enxergar e tentar tirar uma ideia de como funciona... mas isso é tudo com base em estudos com equipamentos modernos... obviamente eles não fornecem as formas bonitas... são gráficos... muito matemático... mas depois a gente sempre tenta simplificar... ver o lado... assim... qualitativo da coisa... por exemplo isso né? tem um impedimento estérico... tem um volume muito grande... uma densidade eletrônica muito grande que impede... (...)*

Quando os químicos falaram sobre o que destaca a química das outras ciências – tanto no momento em que isso foi perguntado diretamente, quanto por ocasião da discussão dos argumentos acerca do reducionismo –, eles evocaram, novamente, o caráter relacional entre entidades e evidências experimentais, expressando a teoria de forma qualitativa.

QA1: *AH/ estudar as moléculas em si né ? acho que de todas as sub-áreas da química... o que elas têm em comum é estudar o comportamento químico das moléculas...(…)*

QA2: *ele ((o químico)) é mais no nível molecular... não que não trabalhe com nível menor... eu trabalho com eletroanalítica... então tem a presença de elétrons... mas é de uma molécula e não de um átomo*

QBQ1: *(...) o biólogo quando ele vai descrever a interação entre duas moléculas... ele usa uma bolinha ((para representar a molécula inteira))... porque o importante pra ele não é a carga daquela molécula... não é a polaridade dela... não é os átomos...(…) ((o químico)) se importa com as partes dentro da molécula... então pra ele ((biólogo)) interessa só que as moléculas interagem... nessas condições elas interagem... só que isso é limitado... porque isso funciona muito bem... mas chega uma hora você vai precisar saber o porquê que elas interagem o porquê elas não interagem... pra você mudar as condições... (...)*

Lemes: *você trabalha com um polímero que é biológico?*

QO1: *trabalho com polímeros bioabsorvíveis... são produtos que a degradação dele é metabolizado pelo corpo... eles são oxidados e entram na via metabólica né? e eles são degradados em C-O dois e água*

Lemes: *e tem alguma propriedade de algum átomo que faz ele ((polímero)) ser desse jeito?*

QO1: *um átomo não... na verdade são os grupos funcionais... são ésteres que é uma função orgânica que ajuda ele ser absorvido*

QBQ2: *talvez porque a física remeta a mim e remeta... na maioria das pessoas... a fórmulas... talvez porque física remeta a isso... e eu acho que a química pode ser compreendida sem você precisar de tantos números... não profundamente... não a magnitude de todas as forças... porque pra isso você precisa de números mesmo... mas eu acho que o fundamento da química... a parte mais básica... ela pode ser compreendida sem essa numerária... enfim...*

Lemes: *no caso da orgânica... os orbitais... eles são explicados baseados nos orbitais da física...*

QF1: *sim/ se você pegar quântica pura... têm uma série de equações que se você olhar você não consegue ver nenhuma representação pra aquilo... então por algum artifício matemático... a gente faz algumas alterações e a gente converte... consegue visualizar aquelas coisas... entendeu? não que não faça sentido... FAZ/ o que ta lá é a mais pura verdade... não é mentira... mas tudo é só representação... e os químicos eu acho que eles buscam muito isso... o que tem de diferente do químico do físico/ o físico prefere olhar pra equação... enquanto o químico prefere olhar para o orbital ... é bem engraçado isso... e o químico vai explicar suas coisas em cima daquilo... naquela representação que foi lhe dada... a química orgânica... por exemplo... é isso... a explicação dos mecanismos é basicamente isso...*

A distinção apontada por QF1 e QBQ2 se baseou também na relação estreita da física com a matemática e a quantificação; e da química com aspectos mais qualitativos. Observa-se, na fala de QF1, o destaque que ele atribui a modelos “concretos” em química, modelos que podem ser associados a uma imagem mental de uma entidade como uma molécula ou um orbital. Em física, por outro lado, o mesmo orbital tende a ser visto como uma entidade matemática, uma equação, não necessariamente associado ao contorno de uma região do espaço, sem referência intuitiva.

Nessa perspectiva, parece que os químicos criaram e fazem uso de seus próprios orbitais, diferentes dos orbitais dos físicos. Os químicos transformaram uma entidade que deriva de cálculos mecânico-quânticos em algo mais “palpável”, referente à forma da densidade eletrônica, e lhe atribuem o estatuto de entidade real. Good (1999) argumenta que a existência de entidades foi estabelecida e, portanto, incorporada em explicações,

muito antes entre os químicos do que entre os físicos. Consequentemente, a realidade de entidades é um aspecto mais marcante na filosofia da química do que nas abordagens que utilizam a física como modelo de ciência. Esse posicionamento converge com a posição de Ramberg (2000), o qual argumenta que a utilização dos arranjos tridimensionais para estruturas moleculares é anterior à mecânica quântica. Assim, as estruturas tridimensionais não são derivadas de equações (que não têm um referente imagético intuitivo), e sim de propriedades que permitiram, desde muito antes, que os químicos desenvolvessem suas teorias sobre estruturas e produzissem novas substâncias.

Os modelos utilizados pelos químicos são, predominantemente, qualitativos, não sendo precisos nem universais; são, porém, mais simples, com grande poder explicativo (Weisberg, 2002). Por exemplo, a mecânica quântica, que opera sobre átomos como peças separadas, difere da abordagem química, que leva em consideração como os átomos estão organizados e relacionados uns com os outros (Mainzer, 1997). Assim, a adoção da física como ciência paradigmática frequentemente conduz a um estatuto subalterno para a química – cujas teorias, modelos e modos de pensar seriam menos corretos e importantes que os da física; ou seja, conduz a um ensino de química com ênfase em quantificações, cálculos e aplicação de algoritmos, em detrimento de aspectos qualitativos, relacionais e classificatórios, que são essenciais no conhecimento químico (Talanquer, 2011a).

O peculiar caráter de circularidade e relatividade das teorias e evidências químicas requer, num primeiro momento, um maior amadurecimento por parte dos aprendizes (Laszlo, 1999). Uma das dificuldades discutidas por Kaya & Erduran (2011), para o ensino de química, é a exaltação do raciocínio dedutivo pela física e matemática, excluindo outras possibilidades de interpretação, como o aspecto relacional da química.

Na segunda entrevista, quando foram perguntados sobre orbitais, os doutorandos apresentaram algumas razões para não utilizar os orbitais como os físicos, e até para não utilizar orbitais nas suas pesquisas, por ser um modelo mais complexo.

QF1: (...) o químico ele associa muito ... todo processo que ele está lidando com... sei lá... que um elétron saiu de um orbital e foi pra aquele... ou uma transição do orbital HOMO pro LUMO...

entendeu? e o físico não tem muito esse conceito... é o que eu vejo... não conheço muitos físicos assim né? mas pelo que eu estudei de química quântica... eu estudei o básico pro meu trabalho... acho que tem essa diferença do químico pro físico... do jeito de pensar... mas eu acho que é um modelo que o químico assumiu... e que explica de uma certa maneira o que ele precisa né? (...)

QO2: é... mas assim... você não precisa ter um conhecimento afimco de orbitais... pra entender a técnica de infravermelho.... obviamente ajuda... e é bom... mas não precisa

QA1: mais prática... no dia-a-dia não ((uso o orbital))... por isso... no entanto... eu tive dificuldade agora de escrever ((sobre orbitais))... porque é o que eu te falei... na prática a gente não... não acaba trazendo... AH/ porque ta acontecendo isso por causa do orbital lá lá lá lá lá lá... não/ praticamente falando aqui do infravermelho... é o estiramento das ligações químicas... mas não chega a pegar o básico... o bê-á-bá né? o que gerou a ligação química

QA2: tem gente que usa ((orbitais)) pra pós... que pode explicar as transições eletrônicas... oxidação-redução... eu não chego nesses modelos... fico mais na energia pra tirar um elétron ou ganhar um elétron no sistema

QBQ1: não... não preciso desse grau de resolução pra eu poder olhar uma proteína/ o máximo que eu vou... olhando pra proteína... o que eu preciso ir é densidade eletrônica... pronto/ não de orbital/ é tipo... potencial eletrostático da superfície da proteína... então... eu vejo a proteína como se fosse uma superfície irregular... então ela têm concavidades... tem sulcos... por quê? por que... porque ela tem efeito estérico entre os átomos... (...)

Lemes: aí eu mostrei aqueles dois artigos que falam de microscopia e tal... e eu não coloquei distribuição eletrônica ((como palavra chave para a escrita do parágrafo))?

QBQ2: NÃO/YES/((super contente))

(...)

QBQ2: distribuição eletrônica eu não to falando um-s-dois... dois-s-dois... não... o que eu quero dizer é... um mapeamento...

Lemes: seria distribuição de distribuir... uma coisa em volta?

QBQ2: ISSO/ é olhar e como se fosse fazer uma topologia... enfim... da coisa.... aqui tem mais elétrons... aqui tem menos elétrons... dá pra fazer uma curva de nível até...

Lemes: a distribuição da densidade eletrônica... quando você pensa no infravermelho... você também está pensando em... nas ligações C-H e tudo mais... você pensa em orbital ou você pensa em ligações mais simples? quando você vai falar da vibração da carbonila... grupo doadores de elétrons... ligação C-H da molécula... você está pensando em termos de orbitais?

QO1: não... em uma coisa mais simples

Lemes: *mas aqui ((no parágrafo escrito)) você está falando em sobreposição de orbitais... aí você utiliza os orbitais pra explicar...*

QO1: *hunrum ((concordando))... ((uso orbital)) pra complementar... na verdade... ligação... pra ir um pouco além...*

A importância dada, pelos entrevistados, aos aspectos qualitativos, reflete na maneira como encaram e usam o conceito de orbital. Eles o empregam “se for necessário”, pois é um conceito “complexo”, mesmo entendendo esse conceito como sendo a “distribuição” eletrônica, como uma região onde estão os elétrons. Os orbitais parecem estar mais relacionados com o que Weininger (1998) relata como sendo a incorporação, ao longo da história, de caráter mais icônico aos “signos químicos”. As falas apresentadas também se referem a outra característica da estrutura do conhecimento químico, que utiliza diferentes modelos/representações e evidências experimentais relacionados à mesma propriedade, corroborando a discussão proposta por Ramsey (1997), e que será abordada na próxima subcategoria.

3.1.2.e. Utilização de múltiplos modelos

As falas que contribuíram para a elaboração da subcategoria “utilização de múltiplos modelos” referem-se a explicações dos fenômenos químicos, ou seja, aos porquês dos fenômenos à luz das teorias químicas. A relativização dos modelos parece fazer com que os químicos utilizem múltiplos modelos na mesma explicação, ou no estudo de aspectos diferentes de um fenômeno, de forma tácita. O conteúdo das falas que compõem essa subcategoria foi encontrado em vários momentos das primeiras entrevistas, mas aprofundamos esse entendimento no segundo grupo de entrevistas, quando se pediu para que os doutorandos explicassem, a partir das suas falas da primeira entrevista, qual a teoria por trás dos dados do infravermelho; qual seu entendimento sobre a imagem dos orbitais; e que modelos sobre ligação usam em suas pesquisas. A seguir, apresentam-se algumas falas que exemplificam, de modo geral, o que foi incluído na subcategoria:

Lemes: (...) na questão do estiramento... você pensa as ligações como orbitais?

QA1: *sim... sim são os orbitais que se sobrepõem e formam a ligação química né?*
(...)

QA1: se é os orbitais se movendo ((nas ligações no infravermelho)) ? na prática... sinceramente... eu não penso em orbitais... agora se você me perguntar... como é que forma as ligações químicas... o que vem na cabeça são os orbitais... a sobreposição né? aqui no caso a sobreposição dos orbitais p

Lemes: então quando vai pensar numa coisa mais prática...

QA1: mais prática... no dia-a-dia não ((uso o orbital))... por isso... no entanto... eu tive dificuldade agora de escrever ((o parágrafo usando a palavra orbital))... porque é o que eu te falei... na prática a gente não... não acaba trazendo... AH/ porque tá acontecendo isso por causa do orbital lá lá lá lá lá... não/ praticamente falando aqui do infravermelho... é o estiramento das ligações químicas... mas não chega a pegar o básico... o bê-á-bá né? o que gerou a ligação química

QBQ2: (...) então infravermelho/ me deu a informação de vibração de ligação/ o RMN me deu informação ali do hidrogênio... da distância de três... e você nunca para pra juntar uma coisa com a outra... então você vai decifrando e continua preso dentro das caixinhas... por mais que você tenha várias técnicas pra chegar num todo... você continua travadinho no pensamento pequeno...(...) cada técnica você se importa com uma coisa/ então pro RMN... eu não tô nem aí se aquela ligação tá fazendo assim... se ela tá vibrando... eu não tô nem aí/ o que eu quero saber é se tem o hidrogênio ali/ o que mais da pra definir/ então você acaba olhando de jeitos diferentes... quando eu vou pro infravermelho... eu não tô nem aí se tem spin nuclear naquele negócio/ não importa/ não precisava saber que ele existia ((o spin nuclear)) pra fazer o infravermelho

Lemes: (...) quando você vai falar da vibração da carbonila... grupos doadores de elétrons... ligação C – H da molécula... você está pensando em termos de orbitais?

QO1: não... em uma coisa mais simples

Lemes: mas aqui ((no parágrafo escrito)) você está falando em sobreposição de orbitais... aí você utiliza os orbitais pra explicar...

QO1: hunrum ((concordando)) ...pra complementar... na verdade... ligação... pra ir um pouco além...

Lemes: Você acha que a mesma ligação que está aqui no infravermelho é a mesma ligação que tá falando aqui de orbitais da densidade eletrônica?

QBQ1: em que sentido é o mesmo?

Lemes: por que por exemplo... aqui eu coloquei C traço H... eu coloquei esse traço... esse traço não representa o orbital...

QBQ1: não... isso não é a forma do orbital... a questão é/ nós tínhamos uma ideia... um modelo de como explicar que o carbono se ligava com o hidrogênio... daí depois de um tempo... foi feito um outro modelo que explicava mais coisas... não que esse modelo de traço... e ligação direta... não explica boa parte do que a gente conhece é que o outro explica um pouco mais... só que tanto é que esse modelo é útil... que a gente usa ele na maioria das coisas... os orbitais a gente usa pra pouca coisa... porque ele é mais complexo... porém mais abrangente... só isso/ é a questão do orbital... é que ambos ((modelo de traço e modelo de orbital)) pressupõem que existe uma densidade de elétrons e esses elétrons... de alguma forma... estão compartilhados... formando orbitais

moleculares... existe uma interconversão entre as teorias... só que elas não se sobrepõem totalmente... elas não são as mesmas

Lemes: (...) quando você está pensando no infravermelho... especificamente... você está pensando em orbitais... como você disse aqui ((texto da segunda entrevista))... ou você está pensando em uma ligação mais simples?

QO2: eu penso numa ligação mais simples... por que é difícil a gente já de início pensar em orbital... pra mim é difícil... então eu penso naquela ligação mais simples e depois... se há necessidade pra entender o efeito... sei lá... o estudo em questão... aí eu começo tentar entender pro lado mais do orbital... que tipo de orbital é s... p... d... mas eu... de início... já penso na ligação simples né? só uma junção de dois átomos... algo mais simples...(...) você não precisa ter um conhecimento afinco de orbitais... pra entender a técnica de infravermelho.... obviamente ajuda... e é bom... mas não precisa

QA2: através da teoria de orbitais moleculares você pode estar explicando certa rigidez que uma ligação tem... se ela é sujeita a rotações... estiramentos ou ela é uma coisa mais rígida... (...) então na verdade você está falando de orbitais pi... pi e sigma... então... dá pra explicar os dois... aqui nesse caso o infravermelho é mais pra compostos orgânicos né? então tem essa possibilidade de estar conciliando... quando você vai para o cobre aqui no outro... seria ligações metálicas... seria mais complicado né?(...) se eu tenho um composto orgânico eu tenho outro tipos de ligações... aqui eu vou ter a teoria de ligação metal-metal... que tem um mar de elétrons né? então para você caracterizar você vai ver como que está espalhado esses elétrons no material

(...)

QA2: tem gente que usa ((orbitais)) pra pós... que pode explicar as transições eletrônicas... oxidação-redução... eu não chego nesses modelos... fico mais na energia pra tirar um elétron ou ganhar um elétron no sistema

Lemes: seria mais os pares de elétrons... e os elétrons...

QA2: é... se ele tem a possibilidade de oxidar espécie ou reduzir... tira ou doa um elétron... mas eu não costumo chegar a explicar por orbitais moleculares... porque dá pra explicar por HOMO... LUMO né? dá pra fazer isso também... mas eu não utilizo

Os químicos investigados (exceto QBQ1 e QBQ2, que deixaram explícito o conhecimento de vários modelos e a possibilidade de serem usados para a explicação do mesmo fenômeno) parecem aceitar tacitamente as limitações de cada modelo, e, por isso, utilizam múltiplos modelos para explicar a ligação química, transitando por aspectos epistemológicos e ontológicos entre os modelos de forma fluente. Essa análise se aproxima da noção de perfil conceitual proposta por Mortimer (1995, 1997, 2006), no tocante à coexistência de várias perspectivas, com diferentes ênfases, para a explicação de um conceito, dependendo do contexto. Entretanto, as falas dos doutorandos diferem quanto ao

modo de se entender a função dos modelos na explicação. Para os químicos investigados, mais que complementaridade, a coexistência de vários modelos para a explicação de um mesmo fenômeno designa certo pragmatismo, o que faz surgir até um híbrido a partir dos vários modelos, sendo um exemplo explícito a fala de QA2 acima.

As referências a representações de modelos mais icônicos podem auxiliar no entendimento de mecanismos de reação (Tontini, 2004), por exemplo, mas podem trazer obstáculos ao ensinar e aprender química, relacionados a concepções alternativas e ao realismo ingênuo (Coll & Treagust, 2001). Assim, a não explicitação de certas regras, utilizadas inconscientemente na manipulação dos modelos, pode contribuir para a dificuldade na compreensão do funcionamento da química por parte daqueles que estão se iniciando no estudo dessa ciência, pois somente a apresentação dos modelos não faz transparecer o caráter de conveniência que utilizamos para a escolha de um ou outro (Erduran & Duschl, 2004). Por exemplo, pesquisadores em química, como observamos anteriormente, criaram um “híbrido” – o chamado orbital dos químicos – que, embora tenha tido origem na mecânica quântica, apresenta características distintas do conceito utilizado por físicos. Isso ocorreu porque os orbitais dos químicos se mostraram muito convenientes para suas explicações; entretanto, se, no contexto do ensino de química, não estiver claro o propósito dessa criação, os aprendizes poderão ficar confusos em relação aos significados do conceito.

Na mesma perspectiva da proposição de Ramsey (1997), os doutorandos parecem utilizar, para cada técnica, por exemplo, representações diferentes, que reforçam a explicação sobre uma propriedade para uma dada molécula. No entanto, essa perspectiva entra em conflito com o realismo químico, que também foi percebido e discutido nas seções 3.1.2.a e 3.1.2.b, pois, se as representações são alteradas à vontade, os modos de visualizar serão independentes das medições, ou seja, independentes das evidências obtidas pelas técnicas. Então, deve-se observar que a perspectiva alternativa, que seria a utilização de um único modelo nas diferentes situações, também é controversa, requerendo

reflexões a esse respeito na formação dos químicos. Harrison e Treagust (2000) enfatizam que a utilização de múltiplos modelos é uma melhor alternativa, se for entendido que cada modelo dá conta de um aspecto do fenômeno ou objeto investigado, não havendo um modelo único e correto. No entanto, essa perspectiva não explica, por exemplo, a concepção dos orbitais dos químicos, que combina elementos clássicos e quânticos em um mesmo modelo, presente nas falas dos doutorandos. Assim, além da simples convivência de múltiplas concepções e modelos, o químico parece estabelecer relações entre ideias anteriores (e.g., clássicas) e novas ideias (e.g., quânticas), formando um híbrido ou mescla, seguindo a perspectiva de “junção dos conceitos” para o crescimento da química, como uma colcha de retalhos (Schummer, 2010), dando origem a modelos de forma clássico-quântica.

Outro aspecto característico da utilização de múltiplos modelos foi a pouca adesão à utilização de modelos de orbitais, o que os entrevistados justificam pela dificuldade e complexidade matemática que o conceito de orbital pressupõe. Diante da dificuldade em lidar com o formalismo matemático associado aos orbitais dos físicos, os químicos os transformaram em orbitais com referentes a imagens, caracterizando sua preferência por modelos mais icônicos. Como discutido na seção 3.1.2.d., a preferência por representações mais icônicas não se dá, necessariamente, por elas serem mais simples, mas por serem representações que expressam mais qualidades e, principalmente, formas, dando mais “concretude” a conceitos abstratos, como ligação química, por exemplo. Isso pode ser explicado pelo fato de os químicos valorizarem explicações mais qualitativas, como foi discutido na subcategoria anterior.

As entrevistas com os doutorandos da área de físico-química, por sua vez, se destacam pela recorrência a modelos com representações mais simbólicas (mais característicos da física), sem, contudo, deixar de empregar, também, modelos com representações mais icônicas, como pode ser observado abaixo:

Lemes: *aqui/ você relacionou as funções matemáticas com o espectro vibracional... mas quando a gente tá falando de infravermelho... a gente tá falando de ligação risquinho... não como orbitais não é?*

QF1: sim... não sei se é um problema do químico... não sei se a gente foi criado assim... por eu não entendo por risquinho... eu já entendi já... já passou muito tempo na minha cabeça como risquinho... mas é muito mais do que isso né? é que é uma atração e repulsão eletrostática de cargas... basicamente/ claro/ o átomo tem um núcleo massivo... aí tem a eletrosfera... os elétrons... é por isso que eu falo do modelo que eu acredito... o movimento dessa atração e repulsão é que dá a característica desse espectro vibracional/ pra mim é isso
(...)

Lemes: ((orbital)) não é só uma função matemática?

QF1: não... não... não é só... (...) mas eu acho que é uma questão é que o físico não quer ver... enquanto que o químico vê/ não tá errado o que o cara fez ((o módulo da função de onda ao quadrado))... mas é um modelo que ele tá criando pra tentar visualizar e explicar as coisas com mais facilidade... então/ assim... então pra mim é essa a diferença... não é que orbital não existe... tem muita gente que fala ... AH/ orbital não existe... existe/ claro que existe ((o orbital))... só que é um conceito muito complexo... é difícil... até pra gente que tá aqui na pós-graduação... acho que é muito complexo...

Lemes: mas se a gente mede a variação da distância de ligação... por que a gente não pode medir o orbital? medir a distribuição eletrônica?

QF2: ah sim/ a gente pode medir a distribuição eletrônica... mas a distribuição eletrônica são vários orbitais... a ideia de vários orbitais... a gente usa o orbital só pra encaixar os elétrons... sabendo que os elétrons ocorrem emparelhados... com os spin opostos... direção de giro... vamos chamar de giro opostos... o que é isso fisicamente? como esses dois elétrons se comportam aí? para que serve esses espaços? onde esses elétrons estavam... ou é orbital... aí tem diferentes tipos de orbitais... pra diferentes tipos de ligações ou diferentes tipos de átomos... por exemplo... átomo de hidrogênio tem apenas orbitais s... átomo de carbono tem orbitais s e p e tals... ((os átomos)) estão em níveis eletrônicos diferentes... portanto... têm energias diferentes... então eles vão ter... espera-se... geometrias diferentes... a geometria em função da energia... como é essa geometria? a gente pode especular... especulamos como? usando a equação de Schrödinger que descreve os orbitais atômicos... mas é uma descrição matemática apenas...

As falas dos físico-químicos evidenciam que a utilização de múltiplos modelos, e o uso de modelos icônicos, parecem estar fortemente relacionados à formação geral em química, e não às características específicas de cada área de pesquisa. Também surgiu nas falas a necessidade de reflexão sobre a utilização de modelos clássicos e quânticos, em especial, na formação básica do químico. No curso de graduação são apresentados diversos modelos possíveis para ligação química, sem a explicitação das controvérsias sobre a “operacionalização” (manipulação) desses modelos – como e quando usar cada

modelo –, não promovendo, assim, uma compreensão mais profunda do conceito de ligação (Erduran, 2005).

Considerando ainda as falas acima, outro ponto a ressaltar, por ser destoante da noção de perfil conceitual, é o diferente entendimento sobre cada modelo. Os orbitais dos físicos instrumentalistas parecem ser diferentes dos orbitais dos químicos; e dentro do grupo dos químicos, os físico-químicos parecem entender os orbitais de uma forma que os aproxima dos físicos instrumentalistas. Assim, as zonas dos perfis conceituais dos físico-químicos e dos demais químicos, referentes ao modelo do orbital, apresentam-se diferentes não só em grau, mas também em significado; contrariando, portanto, a noção de que existem zonas fixas para o perfil conceitual de ligação química entre os indivíduos de uma mesma cultura – a menos que se considere que os físico-químicos constituem uma cultura diferente em relação aos demais químicos.

De modo geral, as categorias e subcategorias discutidas na seção 3.1 exploram as percepções sobre o mundo químico do grupo de doutorandos entrevistados, e podem ser resumidas conforme o Quadro 6.

Quadro 6 - Resumo dos significados de cada categoria e subcategoria.

CATEGORIAS	DESCRIÇÕES DAS CATEGORIAS	SUBCATEGORIAS	DESCRIÇÕES DAS SUBCATEGORIAS
Características da área de atuação da química	Agrupa diretrizes que caracterizam o campo de trabalho dos químicos, de modo a explicitar características que influenciam na motivação da pesquisa e do pesquisador.	Presença profissional no setor produtivo	Expressa a ampla possibilidade de funções ou ofícios para o químico no mercado de trabalho.
		Aplicação prática	Manifesta as aplicações da química, tanto como motivação para o delineamento de projetos pessoais (aplicações mercadológicas para a sociedade), quanto como uma característica da própria ciência (aplicações de teorias para geração de novas entidades teóricas, que retroalimentam as teorias).
		Desenvolvimento de novas formas de explicação	Expressa a forma como o conhecimento químico se amplia.
		Interfaces com outras ciências	Reúne as falas que expressam questões químicas que têm desdobramentos sobre outras ciências.

Quadro 6 (continuação) - Resumo dos significados de cada categoria e subcategoria.

Características do pensamento químico	Constitui-se na reunião de tendências internas da química: as peculiaridades das entidades, teorias químicas, metodologias e formas de pensar dos químicos.	Realismo químico com referência a imagens	Manifesta a confiança na existência de entidades invisíveis a olho nu e nas formas como elas são representadas como modelos concretos.
		Realismo químico sem referência a imagens	Expressa o reconhecimento da existência das entidades submicroscópicas, mas não de suas representações icônicas.
		Valorização das evidências experimentais	Manifesta a valorização das experiências e das evidências geradas por elas, bem como sua função em relação a teorias químicas.
		Caráter qualitativo e relacional entre suas entidades	Expressa a estrutura interna do conhecimento químico, na qual os conceitos encontram-se entrelaçados a outros conceitos, fazendo com que as entidades sejam entendidas de maneira não isolada. Expressa também a preferência por qualidades visuais para descrever as entidades e evidências experimentais.
		Utilização de múltiplos modelos	Manifesta referências a diversos modelos em uma mesma explicação, ou para descrever uma mesma entidade.

Pode-se considerar que as categorias e suas definições, aqui sumarizadas, explicitam características fundamentais do fazer químico, o que pode auxiliar na definição de conteúdos, habilidades e abordagens no contexto do ensino de química.

Considerações finais

Em linhas gerais, este estudo exploratório destacou, entre as concepções dos dez doutorandos entrevistados, algumas características marcantes da química, como suas aplicações, relacionadas ao utilitarismo e também à experimentação; e a relação desta com o realismo químico. Apesar de ser um estudo qualitativo, que não permite afirmações categóricas e universais – de maneira semelhante aos apontamentos sobre o fazer químico explicitado nos resultados acima – as concepções sobre aspectos da filosofia da química, expressos pelos sujeitos da pesquisa, podem ser relacionadas a discussões encontradas na literatura da área, e poderão encontrar aplicações educacionais futuras. As duas categorias e as nove subcategorias, construídas a partir das entrevistas e do estudo da literatura, evidentemente não traduzem uma definição cabal de como a química funciona, mas trazem elementos que podem subsidiar discussões sobre a estrutura do conhecimento químico. Tais discussões trazem possibilidades de fundamentação de propostas para a melhoria tanto de estratégias educacionais quanto da imagem pública da química.

Ao mesmo tempo, o relato apresentado leva à reflexão sobre aspectos externos à química, que sofrem influência e influenciam a sociedade em geral, e sobre aspectos internos, que abrangem os modos como o conhecimento químico é construído e utilizado. As descrições de características da área química revelam aspectos do processo de desenvolvimento de teorias e aplicações, principalmente no que tange a aspectos motivacionais, mas também éticos e ambientais. As percepções evidenciadas neste trabalho, sobre a construção e operação das teorias químicas, sugerem áreas a explorar no tocante à experimentação, modelagem e representações, orbitais e realismo na química, entre outros temas. Embora as categorias e subcategorias tenham sido segmentadas para análise e discussão, elas se relacionam como uma “rede química”, na qual a experimentação é o ponto central, que possibilita relações nas dimensões internas e externas. A experimentação está relacionada tanto com problemas éticos referentes aos produtos dessa atividade (Jacob & Walters, 2005; Schummer, 2001), quanto com a visualização de evidências, que levam à proposição de representações teóricas, culminando

no realismo químico. No entanto, mais investigações são necessárias sobre quando e como ocorre a formação da “ponte” que gera a livre transição entre as medições e evidências de transformações e as explicações abstratas, tão familiares aos químicos.

Outro ponto para reflexão são os múltiplos modelos, utilizados e mesclados de modo tácito nos discursos dos químicos, não havendo dados que indiquem se os químicos compreendem essa operacionalização, ou quando internalizam o processo de utilização de vários modelos ou teorias para uma mesma entidade ou fenômeno. Nem sempre os químicos optam pela utilização de modelos de orbitais em suas explicações, o que os entrevistados justificaram pela dificuldade ou complexidade matemática que o conceito de orbital pressupõe. Diante da dificuldade em lidar com o formalismo matemático associado aos orbitais dos físicos, os químicos entrevistados preferem tratar os orbitais com referência a imagens, caracterizando sua preferência por modelos mais icônicos.

As falas dos físico-químicos, em particular, evidenciam, também, que a utilização de múltiplos modelos, e o uso de modelos icônicos, parece estar fortemente relacionada à formação geral em química, e não às características específicas de cada área de pesquisa. Também surgiu nas falas dos químicos a necessidade de reflexão sobre a utilização de modelos clássicos e quânticos, e também de uma “mistura” dessas duas abordagens, em especial, na formação básica do químico. No curso de graduação são apresentados diversos modelos possíveis, por exemplo, para ligação química, sem a explicitação das controvérsias sobre a “operacionalização” desses modelos, o que pode não resultar em compreensão mais profunda do conceito de ligação (Erduran, 2005).

O conteúdo das entrevistas realizadas também mostra que a postura realista, tanto com referência a imagens, quanto sem referência a imagens, tem papel operacional para os químicos em sua prática de laboratório. No que tange ao fazer químico, o realismo dos químicos é reforçado pelo sucesso na realização de sínteses de substâncias e materiais, pelo uso de equipamentos de caracterização estrutural, e tem contribuído com o desenvolvimento da área. No ensino, porém, a perspectiva realista pode gerar concepções

alternativas acerca das entidades químicas, ou até mesmo o desinteresse em relação a essa ciência, por falta de entendimento de suas teorias.

Entendemos que a presente dissertação tem potencial para contribuir no desenvolvimento de atividades e questionamentos sobre conteúdos, durante a formação inicial do químico, em especial dos professores dessa disciplina – pois é necessária a consideração das controvérsias sobre a realidade química, para melhor compreensão de como essa ciência funciona. Assim, defendemos que é importante incorporar subsídios para reflexão na formação inicial dos químicos, a fim de auxiliá-los a compreender em quê se fundamenta a química, em vez de simplesmente apresentar-lhes conteúdos prontos, como é tão comum no ensino universitário.

Em face do exposto, as hipóteses iniciais – de que o mapeamento das entrevistas traria elementos para caracterizar como o grupo investigado concebe as singularidades da química em relação a outras ciências; de que forneceria indícios sobre a existência, dentro desse grupo, de diferentes concepções; e de que essas concepções estão relacionadas à imersão do indivíduo em diferentes áreas da química – geraram outras questões para investigação, tais como: Quando é construída a peculiar percepção da experimentação e sua relação com o realismo químico? Há diferenças no entendimento do papel do experimento na química, entre licenciandos em química que não tiveram contato com a pesquisa química, e professores/pesquisadores de química e da área de ensino de química? Há diferenças no entendimento do papel da experimentação entre os pesquisadores das diversas sub-áreas da química (orgânica, inorgânica, físico-química, bioquímica, analítica e ensino de química)? Como é entendido, pelo professor formador, o papel da experimentação na formação inicial do professor de química e na produção do conhecimento químico? Há diferenças? Se houver diferenças, os formadores acham pertinente a explicitação desses entendimentos para a formação inicial dos professores de química? Quais são os desafios e obstáculos para se incorporar a perspectiva filosófica da química no seu ensino? Em qual nível de ensino devem ser incorporados esses aspectos?

Em virtude das questões exemplificadas, a categorização exposta origina diversos elementos para discussões de natureza filosófica e educacional. Um desses elementos diz respeito a como a ciência química funciona, uma discussão que pode auxiliar na estruturação curricular de cursos superiores, e mesmo na organização de conceitos nos vários níveis de ensino.

No ensino médio, os exames vestibulares são apontados como justificativa para a não mudança dos conteúdos e para a abordagem tradicional, o que não propicia discussões sobre quais os conteúdos essenciais para se entender química nesse nível de ensino. Para que haja mudança de perspectiva, são necessárias reflexões a respeito de quais são os conteúdos, habilidades e competências básicas necessárias para um não iniciado na ciência compreender como a química funciona, e poder utilizar esse conhecimento no cotidiano. Esperamos que o presente trabalho, que abrange questões genuínas da química, forneça subsídios para essas reflexões.

Em suma, os resultados obtidos e as análises aqui apresentadas sugerem que as categorias e subcategorias construídas podem revelar tendências nas concepções filosóficas do grupo estudado acerca da química. Oferecemos elementos para a reflexão sobre como a química funciona e, por consequência, para embasar discussões e mais pesquisas sobre como a química pode ser mais bem entendida, ensinada e aprendida. Essas considerações podem ser úteis tanto para quem trabalha com química, quanto para quem está aprendendo e, mais importante, para quem está aprendendo a ensinar química.

Referências bibliográficas¹⁷

- Adúriz-Bravo, A. A 'semantic' view of scientific models for science education. **Science & Education**. janeiro, 2012. Disponível em: <<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11191-011-9431-7>>. Acesso em 28/11/2012.
- Araujo Neto, W. N. Estudos sobre a noção de representação estrutural na educação em química a partir da semiótica e da filosofia da química. **Revista Virtual Química**, v. 4, n.6, p. 719-738, 2012.
- Bachelard, G. **A filosofia do não**. trad. Ramos, J.J.M. Lisboa: Presença, 1984.
- Baird, D. Analytical chemistry and the 'big' scientific instrumentation revolution. In: Morris, P.J.T. (Orgs.). **From Classical To Modern Chemistry: The Instrumental Revolution**. Cambridge: Royal Society of Chemistry, p 29-56, 2002.
- Bernal, A.; Daza, E. E. On the Epistemological and Ontological Status of Chemical Relations. **HYLE**, v.16, n.2, p. 80-103, 2010.
- Berson, J.A. Fundamental theories and their empirical patches. **Foundation of chemistry**, v. 10, n.3, p.147-156, 2008.
- Bogdan, R.; Biklen, S. **Investigação qualitativa em educação: uma introdução à teoria e aos métodos**. trad. Alvarez, M.J.A.; Santos, S.B. dos; Baptista, T.M. Porto: Porto Editora, 1994
- Bucat, B.; Mocerino, M. Learning at the sub-micro level. In: Gilbert J. K. et al. (Orgs.) **Multiple representations in chemical education**, v. 4. Dordrecht: Springer, p. 11-29, 2009.

¹⁷ As referências bibliográficas estão de acordo com a norma NBR6023/2002 da Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT).

- Burewicz, A.; Miranowicz, N. Beyond the dimensionality of visualization in chemistry. in: Earley, J.E. (Orgs.) **Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy**. New York: Annals of the New York Academy of Science, v. 988, p. 244-249, 2003.
- Caldin, E. F. The structure of chemistry in relation to the philosophy of science. **HYLE**, v. 8, n.2, p. 103-121, 2002.
- Cerruti, L. Chemicals as instruments: a language game. **HYLE**, v. 4, n.1, p.39-61, 1998.
- Coll, R.K.; Treagust, F.D. Lerner's' mental models of chemical bonding. **Research in Science Education**, v.31, n.3, p. 357-382, 2001.
- Del Re, G. Models and analogies in science. **HYLE**, v. 6, n. 1, p. 5-15, 2000.
- Del Re, G. Ontological status of molecular structure. **HYLE**, v. 4, n. 2, p. 81-103, 1998.
- Earley, J. E. Would introductory chemistry courses work better with a new philosophical basis? **Foundation of chemistry**, v.6, p. 137-160, 2004.
- Erduran, S. Applying the philosophical concept of reduction to the chemistry of water: Implications for chemical education. **Science & Education**. v.14, p. 161–171, 2005.
- Erduran, S. Philosophy of chemistry: an emerging field with implications for chemistry education. In: Bevilacqua, F.; Giannetto, E.; Matthews, M. (Orgs.). **Science Education and Culture**. Dordrecht: Kluwer, p. 165-177, 2001.
- Erduran, S.; Adúriz-Bravo, A.; Mamlok-Naaman, R.. Developing epistemologically empowered teachers: examining the role of philosophy of chemistry in teacher education. **Science & Education**, v.16, n.9–10, p. 975–989, 2007.
- Erduran, S.; Duschl, R.A. Interdisciplinary Characterizations of Models and the Nature of Chemical Knowledge in the Classroom. **Studies in Science Education**, v.40, p.105-138, 2004.

Erduran, S.; Scerri, E. The nature of chemical knowledge and chemical education. In: Gilbert, J.K.; de Jong, O.; Justi, R.; Treagust, D.F.; van Driel, J.H. (Orgs.). **Chemical education: towards research-based practice**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers. p.7-27, 2002.

Eriksen, K. K. The future of tertiary chemical education: A *bildung* focus? **HYLE**, v. 8, n.1, p. 35-48, 2002.

Fernández-González, M. Idealization in Chemistry: Pure Substance and Laboratory Product. **Science & Education**. dezembro, 2011. Disponível em: <
<http://link.springer.com/article/10.1007/s11191-011-9428-2>>. Acessado em: 9/02/2012.

Francoeur, E. Beyond dematerialization and inscription: Does the materiality of molecular models really matter? **HYLE**, v. 6, n. 1, p. 63-84, 2000.

Goded, P. A. El conocimiento profesional naturaleza, fuentes, organizacion y desarrollo. **Cuadrante**, v.8, p.111-138, 1999.

Goedhart, M. J. A new perspective on the structure of chemistry as a basis for the undergraduate curriculum. **Journal of Chemical Education**, v. 84, p. 971-976, 2007.

Good, R.J. Why are chemists turned off by philosophy of science? **Foundations of chemistry**, v. 1, p. 65-95, 1999.

Grosholz, E.R.; Hoffmann, R. How symbolic and iconic languages bridge the two worlds of the chemists: a case study from contemporary bioorganic chemistry. In: Bhushan, N.; Rosenfeld, S. (Orgs.). **Of minds and molecules**. New York: Oxford University Press, p. 230-247, 2000.

Hammond, G. S.; Nyholm, R. The structure of chemistry. **Journal of Chemical Education**, v. 48, n. 1, p. 6-13, 1971.

Harrison, A.G.; Treagust, D.F. Learning about atoms, molecules, and chemical bonds: a case study of multiple-model use in grade 11 chemistry. **Science Education**, v.84, n.3, p. 352-381, 2000.

Hendry, R. F. Molecular models and the question of physicalism. **HYLE**, v. 5, n.2, p.143-160, 1999.

Hoffmann, R. What might philosophy of science look like if chemists built it? **Synthese**, v. 155, n. 3, p. 321-336, 2007.

Izquierdo-Aymerich, M. School Chemistry: An Historical and Philosophical Approach. **Science & Education**. maio, 2012. Disponível em: <<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11191-012-9457-5>>. Acesso em 10/06/2012.

Jacob, C. ; Walters, A. Risk and responsibility in chemical research: The case of agent orange. **HYLE**, v. 11, n.2, p. 147-166, 2005.

Jacob, C. Analysis and synthesis: interdependent operations in chemical language and practice. **HYLE**, v.7, n.1, p. 31-50, 2001.

Jenkins, Z. Do you need to believe in orbitals to use them? Realism and the autonomy of Chemistry. **Philosophy of Science**, v. 70, p. 1052-62, 2003.

Justi, R. S. La enseñanza de ciencias basada en la elaboración de modelos. **Enseñanza de las ciencias**, v.24, n.2, p. 175-184, 2006.

Justi, R.S. Gilbert, J.K. Philosophy of chemistry in university chemical education: the case of models and modelling. **Foundations of chemistry**, v.4, p. 213-240, 2002.

Kaya, E.; Erduran, S. Integrating epistemological perspectives on chemistry in chemical education: The cases of concept duality, chemical language, and structural

- explanations. **Science & Education**, outubro, 2011. Disponível em: <
<http://www.springerlink.com/content/h7789r01m1816t60/> >, Acessado em: 18/11/2011.
- Knight, D. Exalting understanding without depressing imagination: depicting chemical process. **HYLE**, v. 9, n.2, p. 171-189, 2003.
- Kovac, J. Gifts and Commodities in Chemistry. **HYLE** , v. 7, n. 2, p. 141-153, 2001.
- Kovac, J. Theoretical and practical reasoning in chemistry. **Foundations of chemistry**, v. 4, p. 163-171, 2002.
- Kuhn, T. S. **A estrutura das revoluções científicas**. São Paulo: Perspectiva. 1998.
- Labarca, M. Acerca de la naturaleza de la química: algunos comentarios. **Educación en la química**, v. 15 n. 2, p. 77-158, 2009.
- Labarca, M. La filosofía de la química y su impacto en la educación en química. **Educación en la química**, v.12, n.2, p. 57-106, 2006.
- Labarca, M.G. Filosofía de La química: a poco más de diez años de su nacimiento. In: Martins, R.A.; Lewowicz, L.; Ferreira, J. M. H.; Silva, C. C.; Martins, L. A. (Orgs.). **Filosofia e história da ciência no Cone Sul**. Campinas: AFHIC, p. 414-422, 2010.
- Labarca, M.G.; Lombardi, O. The ontological autonomy of the chemical world. **Foundations of Chemistry**, v. 7, n. 2, p. 125-148, 2005.
- LaFollette, M. C. Taking Science to the Marketplace: Examples of Science Service's Presentation of Chemistry during the 1930s. **HYLE**, v. 12, n.1, p. 67-97, 2006.
- Laszlo, P. Chemical Analysis as dematerialization. **HYLE**, v.4, n. 1, p. 29-38, 1998.
- Laszlo, P. Circulation of concepts. **Foundation of chemistry**, v. 1, n. 3, p. 225–239, 1999.
- Laszlo, P. Foundations of Chemical Aesthetics. **HYLE**, v. 9, n.1 p. 11-32, 2003.
- Laszlo, P. On the Self-Image of Chemists, 1950-2000. **HYLE**, v. 12, n.1, p. 99-130, 2006.

Laszlo, P. Playing with Molecular Models. **HYLE**, v. 6, n. 1, p. 85-97, 2000.

Laszlo, P. Tools, instruments and concepts: the influence of the second chemical revolution.

In: Morris, P.J.T. (Orgs.). **From Classical To Modern Chemistry**: The Instrumental Revolution. Cambridge : Royal Society of Chemistry. p. 171-87, 2002.

Lefèvre, W. Viewing chemistry through its way of classifying. **Foundation of chemistry**. v. 14, n. 1, p. 25–36, 2012.

Mainzer, K. Symmetry and Complexity-Fundamental Concepts of Research in Chemistry. **HYLE**. v. 3, p. 29-49, 1997.

Mainzer, K. Computational Models and Virtual Reality: New Perspectives of Research in Chemistry. **HYLE**, v. 5 , n.2, p. 117-126, 1999.

Matthews, M.R. Changing the Focus: From Nature of Science (NOS) to Features of Science (FOS). In: Khine, M.S. (Orgs.). **Advances in Nature of Science Research**: Concepts and Methodologies. Dordrecht: Springer, p. 3-26, 2012.

Mortimer, E. F. Conceptual change or conceptual profile change? **Science & Education**, v. 4, n. 3, p. 267-285, 1995.

Mortimer, E. F. **Linguagem e formação de conceitos no ensino de ciências**. Belo Horizonte: Editora UFMG. 2006.

Mortimer, E. F. Para além das fronteiras da química: relações entre filosofia, psicologia e ensino de química. **Química Nova**. v. 20, n. 2, p.200-207, 1997.

Mulder , P. Are orbitals observable? **HYLE**. v. 17, n.1, p. 24-35, 2011.

Nagel, E. **The structure of science**: problems in the logic of scientific explanation. London : Routledge & Kegan Paul. 1982.

Niiniluoto, I. **Critical scientific realism**. New York: Oxford University Press. 1999.

- Ogilvie, J.F. Is a molecular orbital measurable by means of tomographic imaging? **Foundation of Chemistry**, v.13, n.2, p.87-91, 2011.
- Pessoa Jr, O. A classificação das diferentes posições em filosofia da ciência. **Cognitio-estudos**. v. 6,n.1, p.1-73, 2009.
- Popper, K. R. **Conjectures and refutations**: the growth of scientific knowledge. London: Routledge & Kegan Paul, 1972.
- Pozo, J. I.; Crespo, M. A. G. C. **A aprendizagem e o ensino de ciências**: do conhecimento cotidiano ao conhecimento científico. trad. Freitas. Porto Alegre: Artmed. 2009.
- Preti, D. (Orgs.) **O discurso oral culto**. São Paulo: Humanitas Publicações, 1999.
- Ramberg, P. J. Pragmatism, belief, and reduction: Stereoformulas and atomic models in early stereochemistry. **HYLE**. v. 6 , n. 1, p. 35-61, 2000.
- Ramsey, J. L. Molecular shape, reduction, explanation and approximate concepts. **Synthese**, v. 111, p. 233–251, 1997.
- Root-Bernstein, R. Sensual Chemistry: Aesthetics as a Motivation for Research. **HYLE**, v. 9, n.1, p. 33-50, 2003.
- Rozentaliski, E.F.; Lemes, A.F.G.; Porto, P.A. **Orbitais dos químicos?** Uma discussão à luz da filosofia da química e implicações para o ensino. In: 2a. Conferencia Latinoamericana del International History, Philosophy, and Science Teaching Group, 2012, Mendoza, Argentina. 2a. Conferencia Latinoamericana del International History, Philosophy, and Science Teaching Group - Libro de Resúmenes. Mendoza, Argentina: IHPST, p. 67, 2012.
- Santaella, L. **O que é semiótica?** São Paulo: Brasiliense, 1983.
- Santos, W. L. P. dos; Schnetzler, R.P. Função social: o que significa ensino de química para formar o cidadão? **Química Nova na escola**. n.4, p. 26-34, 1996.

- Scerri, E. Chemistry, spectroscopy and the question of reduction. **Journal of Chemical Education**, v. 68, n.2, p.122-126, 1991.
- Scerri, E. R. Have orbitals really been observed? **Journal of Chemical Education**. v. 77, p. 1492-4, 2000b.
- Scerri, E. R. La nueva filosofía de la química y su importancia en la educación química. In: Chamizo, J. A. (Orgs.) **La esencia de la química**: Reflexiones sobre filosofía y educación. México: FQ-UNAM, p.181-192, 2007b.
- Scerri, E. R. Philosophy of chemistry: A new interdisciplinary field? **Journal of Chemical Education**, v. 77, n.4, p. 522-525, 2000a.
- Scerri, E. R. Some aspects of the metaphysics of chemistry and the nature of the element. **HYLE**, v. 11, n.2, p. 127-145, 2005.
- Scerri, E. R. The ambiguity of reduction. **HYLE**, v. 13, n.2, p. 67-81, 2007a.
- Schummer, J. Ethics of chemical synthesis. **HYLE**, v. 7, n. 2, p.103-124, 2001.
- Schummer, J. Aesthetics of Chemical Products: Materials, Molecules, and Molecular Models. **HYLE**, v. 9, n.1, p. 73-104, 2003b.
- Schummer, J. Chemical versus Biological Explanation: Interdisciplinarity and Reductionism in the 19th-Century Life Sciences. In: Earley, J.E. (Orgs.). **Chemical Explanation**: Characteristics, Development, Autonomy. New York: Annals of the New York Academy of Science, v. 988, p. 269-281, 2003a.
- Schummer, J. Coping with the growth of chemical knowledge: challenges for chemistry documentation, Education and working chemists. **Educación química**, v. 10, n. 2, p. 92-101, 1999.

- Schummer, J. Physical Chemistry: Neither Fish nor Fowl? In: Janich, P.; Psarros, N. (Orgs.) **The Autonomy of Chemistry**. Würzburg: Königshausen & Neumann. p. 135-148, 1997d.
- Schummer, J. Scientometric studies on chemistry I: The exponential growth of chemical substances 1800-1995. **Scientometrics**. v. 39, n. 1, p. 107-123, 1997b.
- Schummer, J. Scientometric studies on chemistry II: aims and methods of producing new chemical substances. **Scientometrics**. v. 39, n. 1, p. 125-140, 1997c.
- Schummer, J. The chemical core of Chemistry I: A conceptual Approach. **HYLE**, v. 4, n.2, p. 129-162, 1998.
- Schummer, J. The Impact of Instrumentation on Chemical Species Identity from chemical substances to molecular species In: Morris, P.J.T. (Orgs) **From Classical To Modern Chemistry: The Instrumental Revolution**. Cambridge : Royal Society of Chemistry. p. 188-211, 2002.
- Schummer, J. The Philosophy of Chemistry. In: Allhoff, F. (Orgs.) **Philosophies of the Sciences: A Guide**. Oxford: Wiley-Blackwell Publishing. p.163-183, 2010.
- Schummer, J. Towards a philosophy of chemistry. **Journal for general philosophy of science**. v. 28, n.2, p. 307-336, 1997a.
- Schummer, J. Why do Chemists Perform Experiments? In: Sobczyńska, D.; Paweł, Z.; Zielonacka-Lis, E. (Orgs.), **Chemistry in the Philosophical Melting Pot**. Frankfurt: Peter Lang, p. 395-410, 2004.
- Schummer, J.; Spector, T.I. The Visual Image of Chemistry: Perspectives from the History of Art and Science. **HYLE**, v. 13, p.3-41, 2007.
- Shulman, L. Knowledge and Teaching: Foundations of the New Reforms. **Harvard Educational Review**, v.57, n.1, p. 1–22, 1987.

Sjöström, J. The Discourse of Chemistry (and Beyond). **HYLE**, v. 13, n.2, p. 83-97, 2007.

Souza, K.A.F.D.; Porto, P.A. (2011) **Estratégias visuais na construção de uma realidade química**: análise semiótica das ilustrações em livros didáticos ao longo do século XX. In: Encontro Nacional de Pesquisa em educação em Ciências, 2011, Campinas: ABRAPEC, 2011. Disponível em: <
<http://www.nutes.ufrj.br/abrapec/viiienpec/resumos/R0929-1.pdf> >. Acessado em: 4/02/2013.

Souza, K.A.F.D.; Porto, P.A. **How Chemistry Works?** Reflections on Triadic Approaches and a Contribution From Peircean Semiotics. In: 2012 NARST Annual International Conference, Indianápolis, IN, EUA. 2012 NARST Annual Conference Presentation Abstracts. Reston, VA, EUA: NARST, p. 65-66, 2012.

Souza, K. A. F. D. **Estratégias de comunicação em química como índices epistemológicos**: análise semiótica das ilustrações presentes em livros didáticos ao longo do século XX. 2012. 189p. Tese - Programa de Pós-Graduação em Química. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo.

Stein, R. L. Towards a Process Philosophy of Chemistry. **HYLE**, v. 10, n.1, p. 5-22, 2004.

Talanquer, V. Macro, submicro and symbolic: the many faces of the chemistry “triplet”. **International Journal of Science Education**, v. 33, n. 2, p. 179-195, 2011b.

Talanquer, V. School Chemistry: the need for transgression. **Science & Education**, setembro, 2011a. Disponível em: <
<http://www.springerlink.com/content/j2r0lh064n28r83k/>>. Acessado em: 18/11/2011.

Talanquer, V.; Pollard, J. Let's teach how we think instead of what we know. **Chemical Education Research and Practice**, v.11, p.74–83, 2010.

- Tomasi, J. Towards 'chemical congruence' of the models in theoretical chemistry. **HYLE**, v.5, n.2, p. 79-115, 1999.
- Tontini, A. Developmental aspects of contemporary chemistry: some philosophical reflections. **HYLE**, v.5, n. 1, p. 57-76, 1999.
- Tontini, A. On the Limits of Chemical Knowledge. **HYLE**, v. 10, n.1, p. 23-46, 2004.
- Treagust, D.F.; Chittleborough, G. Chemistry: A matter of understanding representations In: Brophy, J. (Orgs.). **Subject-specific instructional methods and activities**. New York: Emerald Group Publishing Limited, v.8, p.239-267, 2001.
- Trindle, C. Entering Modeling Space: An Apprenticeship in Molecular Modeling. **HYLE**, v. 5, n.2, p. 127-142, 1999.
- USP. **Programa de Aperfeiçoamento de Ensino (PAE)** . maio, 2005. Disponível em: <
<http://www.prgp.usp.br/pt/interna1/pae.html>>. Acesso em 8/11/2012.
- Vemulapalli, G. K. Theories of the chemical bond and its true nature. **Foundations of Chemistry**, n.10, p.167–176, 2008.
- Vihalemm, R. The autonomy of chemistry: old and new problems. **Foundations of chemistry**, v.13, n.2, p. 97–107, 2011.
- Weininger, S. J. Contemplating The Finger: Visuality and the Semiotics of Chemistry. **HYLE**, v. 4, n. 1, p. 3-27, 1998.
- Weisberg, M. Qualitative theory and chemical explanation. **Philosophy of science**. v.71, n.5, p. 1071-1081, 2002.
- Zeidler; P. The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure. **HYLE**, v. 6, n. 1, p. 17-34, 2000.

Apêndice 1 – Instrumento para coleta de dados do primeiro e segundo grupo de entrevistas

Quadro 1 - Roteiro para a primeira entrevista.

1. Levantamento do Perfil Doutorandos

1.1 Mês e Ano de ingresso: _____

1.2 Doutorado direto? ()SIM; ()NÃO.

1.3 Fez estágio PAE? ()SIM; ()NÃO.

Se sim, em quais disciplinas?

1.4 Já trabalhou em indústria ou outro tipo de empresa? ()SIM; ()NÃO.

Se sim, quanto tempo?

1.5 Já lecionou? ()SIM; ()NÃO.

Se sim, quanto tempo? Em que nível?

2. Perguntas diretas

O que o fez escolher o curso de Química (graduação)?

O que o fez escolher a área de pesquisa do seu doutorado?

Trabalhou em alguma outra área antes?

Na sua opinião, o que os químicos mais fazem?

Se você fosse desenhar o logotipo de um laboratório de pesquisa em química (pode ser o seu), que símbolo escolheria? Esboce, sem se preocupar com a qualidade do desenho. Se não quiser desenhar, explique como gostaria que fosse o desenho.

3. Atividades

3.1) Explique a relação entre o espectro, as tabelas a seguir, e a molécula representada abaixo.

Figura 1 - Espectro de Infravermelho da substância A. (Ref.: Lopes ,W. A.; Fascio M. A. Esquema para interpretação de espectros de substâncias orgânicas na região do Infravermelho. *Química. Nova*, v. 27, n. 4, pp. 670-673, 2004.) .

Substância A (C ₇ H ₆ O)	
Cálculo do IDH (Índice de Deficiência de Hidrogênio: $IDH = (C - M/2) + T/2 + 1$, Sendo C = número de átomos de carbono; M = número de átomos monovalentes e T = número de átomos trivalentes.):	
$IDH_{(Substância\ A)} = (7 - 6/2) + 1 = 5 \rightarrow \text{Anel Aromático}$	
Análise funcional	
1702 cm ⁻¹	$\nu C=O$;
2820 e 2738 cm ⁻¹	$\nu C(=O)$
1598 e 1455 cm ⁻¹	$\nu C=C$ (ArH);
3064 cm ⁻¹	νCsp^2-H
746 e 688 cm ⁻¹	$\delta C-H$ (ArH), monosubstituído
Sendo ν = estiramento e δ = deformação.

3.2) Como você define o que é uma “descoberta” em ciência?

Compare as duas comunicações de descobertas em Química, transcritas a seguir:

JACS
COMMUNICATIONS

Published on Web 02/10/2005

Discovery of and Mechanistic Insight into a Ligand-Modulated Palladium-Catalyzed Wacker Oxidation of Styrenes Using TBHP

Candace N. Cornell and Matthew S. Sigman*

Department of Chemistry, University of Utah, 315 South 1400 East, Salt Lake City, Utah 84112-8500

Received November 11, 2004; E-mail: sigman@chem.utah.edu

"Descoberta e compreensão do mecanismo da oxidação de Wacker de estirenos, catalisada por Pd e modulada por ligantes"

We report herein the discovery and preliminary mechanistic considerations of a promising new N-heterocyclic carbene-modulated Pd-catalyzed Wacker oxidation that uses tert-butylhydroperoxide (TBHP). (p. 2796)

"Relatamos aqui a descoberta e considerações mecanísticas preliminares de uma promissora nova oxidação de Wacker modulada por carbenos N-heterocíclicos e catalisada por Pd, que usa *terc*-butilhidroperóxido" (p. 2796, tradução nossa)

CiênciaHoje®

Jornal de Ciência, Tecnologia e Empreendedorismo

Diretor: Jorge Massada

Subdiretores: Raquel Soares e Tiago Fleming Outeiro

O elemento 117 do quadro de Mendeleiev

Investigadores russos e norte-americanos preenchem novo espaço na tabela periódica

2010-04-11

Investigadores russos e norte-americanos desenvolveram um novo elemento químico – o 117 –, que permitirá uma série de novas descobertas. A representação da novidade no quadro de Mendeleiev (tabela periódica) vem ocupar o espaço em branco na sétima fila, junto dos elementos 'pesados', aqueles com massa atômica elevada. Após as recentes descobertas dos 113, 114, 115, 116 e 118, o 117 permanecia ausente.

Tabela Periódica dos Elementos

3.3) Se um aluno seu trouxesse esses artigos para você, como explicaria o que eles veiculam?

letters to nature

Direct observation of *d*-orbital holes and Cu–Cu bonding in Cu₂O

J. M. Zuo*, M. Kim*, M. O’Keeffe† & J. C. H. Spence*

** Department of Physics and Astronomy, † Department of Chemistry, Arizona State University, Tempe, Arizona 85287, USA*

NATURE | VOL 401 | 2 SEPTEMBER 1999

“Observação direta de buracos dos orbitais d e da ligação Cu-Cu no Cu₂O”

“We have used a recently developed method of quantitative convergent-beam electron diffraction combined with X-ray diffraction to map the charge density distribution in the simple oxide Cu₂O, the results of which we then compare with electronic-structure calculations. We are able to image directly the d holes on the copper atoms, and also demonstrate the existence of Cu-Cu bonding in this compound.” (p. 49, grifo nosso).

Tradução nossa: “Usamos um método desenvolvido recentemente, de difração quantitativa de elétrons em feixe convergente, combinada com difração de raios X, para mapear a distribuição de densidade de carga no óxido simples Cu₂O. Comparamos então os resultados com cálculos de estrutura eletrônica. Fomos capazes de produzir imagens diretamente dos buracos d nos átomos de cobre, e também de demonstrar a existência da ligação Cu-Cu nesse composto.”.

"Na fig. a, mostramos um gráfico tridimensional da diferença entre a densidade de carga do cristal (obtida pelo experimento) sobreposto às densidades de carga esféricas do O²⁻ e do Cu⁺ calculadas pela multi-configuração do método de Dirac-Fock (...) A fig. b mostra um mapa de contorno da diferença de densidade de carga (...) Na fig. c, também obtivemos o gráfico do mapa teórico de densidade de carga" (p. 51, tradução nossa).

Imaging the atomic orbitals of carbon atomic chains with field-emission electron microscopy

I. M. Mikhailovskij,* E. V. Sadanov, T. I. Mazilova, V. A. Ksenofontov, and O. A. Velicodnaja

Department of Low Temperatures and Condensed State, National Scientific Center, Kharkov Institute for Physics and Technology, Academicheskaja, 1, Kharkov 61108, Ukraine

(Received 17 July 2009; revised manuscript received 2 September 2009; published 7 October 2009)

A recently developed high-field technique of atomic chains preparation has made it possible to attain the ultrahigh resolution of field-emission electron microscopy (FEEM), which can be used to direct imaging the intra-atomic electronic structure. By applying cryogenic FEEM, we are able to resolve the spatial configuration of atomic orbitals, which correspond to quantized states of the end atom in free-standing carbon atomic chains. Knowledge of the intra-atomic structure will make it possible to visualize generic aspects of quantum mechanics and also lead to approaches for a wide range of nanotechnological applications.

“Imagem de orbitais atômicos de cadeias de carbono atômico com microscópio eletrônico de emissão de campo”

“Uma técnica de alto campo para preparação de cadeias atômicas, recentemente desenvolvida, tornou possível obter resolução ultra-alta na microscopia eletrônica de emissão de campo (FEEM), que pode ser usada para fazer imagens diretas da estrutura eletrônica intra-atômica. Aplicando FEEM criogênica, somos capazes de resolver a configuração espacial de orbitais atômicos, que correspondem a estados quantizados do átomo terminal de cadeias de carbono. O conhecimento da estrutura intra-atômica tornará possível a visualização de aspectos genéricos da mecânica quântica, e também levar a abordagens para uma ampla gama de aplicações nanotecnológicas.” (p.165404-1, tradução nossa.).

“A primeira imagem eletrônica de emissão de campo do átomo terminal [Fig. a] apresenta distribuição de intensidade com simetria esférica, com intensidade máxima no centro, como é esperado para estados do tipo s; a segunda imagem [Fig. b], por sua vez, tem um nó pronunciado no centro, como é esperado para os estados do tipo p... As figuras [c e d] mostram padrões representativos de dois átomos, um dos quais muda sua imagem FEEM espontaneamente... Esta mudança corresponde à transformação $s \rightarrow p$ do orbital eletrônico do átomo terminal.” (p. 165404-3, tradução nossa.)

3.4) Compare e comente as seguintes frases:

“Decompor a água nos gases hidrogênio e oxigênio não explica a ‘aquosidade’ da água.”

Mayr, E. *Biologia, ciência única: reflexões sobre a autonomia de uma disciplina científica*. Trad. Marcelo Leite. São Paulo: Companhia das Letras, 2005, p. 93.

“Conhecer a sequência de disparos de neurônios de quando o poeta escreveu determinado verso, ou em nossa mente quando o lemos, ou na mente da pessoa que enviou a carta, conhecer a fantástica e bela complexidade das ações bioquímicas que estão por trás do disparo dos neurônios, e a química e a física por trás dela, tal conhecimento é incrível (...), mas ele nada tem a ver com entender o poema.”

Hoffmann, R. *O mesmo e o não mesmo*. Trad. Roberto Leal Ferreira. São Paulo: Editora Unesp, 2000, p. 39.

“No início de 1828, o químico Wöhler teve sucesso em preparar substâncias orgânicas artificialmente e colocou em dúvida o importante e famoso conceito de “força vital”. (...) Deste então, o estudo de compostos orgânicos segue em rápidos avanços, passando a se tornar mais clara a falsa idéia de que há uma diferença entre substâncias orgânicas e corpos inorgânicos. A partir de substâncias inorgânicas simples, os Químicos podem agora preparar artificialmente quase todas as substâncias que são encontradas em organismos. Embora algumas dessas substâncias ainda não tenham sido obtidas, não existe dúvida de que elas poderão ser obtidas num futuro próximo.”

Oparin, A. I. *The origin of life*. trad. inglesa de John Desmond Bernal, 1924, p. 208, tradução nossa.

“Não muito tempo atrás, a Física e a Química era duas ciências separadas com o mínimo de conexão. A Física era a ciência do comportamento dos corpos independente da composição química, e a Química era a ciência da transformação das substâncias independente do tamanho ou movimento. As duas ciências entraram profundamente na região microscópica, se conectando. Agora, todo o fundamento da Química tem sido entendido, e pode ser reduzido às leis atômicas da Física.”

Heitler, W. Quantum Chemistry: the Early Period. *International Journal of Quantum Chemistry*, 1967, v. I, pp. 13 e 35, tradução nossa.

“As leis físicas subjacentes, necessárias para a teoria matemática de grande parte da Física, e de toda a Química, são [agora] completamente conhecidas; e a única dificuldade é que a aplicação exata dessas leis conduz a equações complicadas demais para se resolver.”

Dirac, P. A. M. Quantum mechanics of many-electron systems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 1929, p. 714, tradução nossa.

Quadro 2 – Roteiro para a segunda entrevista¹⁸.

QF1

Lemes: essa aqui é a primeira atividade... esse é um espectro de infravermelho... a tabela com os dados e a estrutura da molécula... qual que é a relação entre esses três tipos de informação?

pra mim... isso aqui é... ((o espectro do infravermelho é)) nada mais nada menos... que a movimentação atômica né? o modelo que explica os modos vibracionais dessa molécula... é a única informação que () é uma informação estrutural... do que eu tenho no meu composto que eu to analisando...

Lemes: você acha que isso é uma evidência experimental?

eu acho que sim...

Lemes: e qual a diferença entre a evidência experimental dada por essa instrumentação e se eu falar que esse benzaldeído é líquido... volátil... incolor... qual a diferença entre essas duas evidências?... tem alguma diferença?

não sei... aqui ((dados do infravermelho)) eu consigo visualizar melhor... acho... a molécula... se você me falar... tá aqui um benzaldeído... não sei... talvez pra quem trabalha mais ou tem mais afinidade com esse tipo de composto... se você falar ele já imagina a molécula/ agora... pra quem tá querendo descobrir ou querendo entender a estrutura molecular... com isso aqui ((dados do infravermelho)) ele já começa tem uma noção melhor... não sei...

(...)

Lemes: se seu aluno trouxesse esses dois artigos e perguntasse... a professor... o que que é isso ((mostrando os artigos de observação de orbitais))? NOSSA/ que legal... a gente consegue vê... como que você explicaria pra ele...

eu sempre achei essa parte de estrutura atômica... mais quântica assim... pra explicar pra uma pessoa não tem tanto conhecimento... eu acho bastante complicado...

Lemes: os dois estão falando que obtiveram uma imagem de como que é né?

bom... eu tenho um conceito de orbital que eu aprendi em química quântica... só que... nem

¹⁸ Ressalta-se que não foi mostrado ao pós-graduando qual era o seu código na pesquisa.

todo mundo têm...

Lemes: qual que é seu conceito?

são simplesmente funções matemáticas e que tipo... e não tem significado físico assim... é complicado... pra quem é um estudante da nossa área... pra quem não é...

(...)

o que tem de diferente do químico do físico/ o físico prefere olhar pra equação... enquanto o químico prefere olhar para o orbital ... é bem engraçado isso... e o químico vai explicar suas coisas em cima daquilo... naquela representação que foi lhe dada... a química orgânica... por exemplo... é isso... a explicação dos mecanismos é basicamente isso...

QF2

infravermelho é uma técnica que mede... basicamente... a frequência de vibração das ligações químicas... dá informação sobre força de ligação... e estrutura da molécula... não é a melhor técnica para determinação estrutural... mas dá uma boa ideia/ a tabela tem correspondência... é uma tabulação do gráfico... pegando as principais frequências... as principais bandas

Lemes: e como você faz a relação do gráfico virar a molécula?

bom... temos aqui uma banda em mil setecentos e dois que a gente atribui pra carbonila... as bandas dois mil oitocentos e vinte e dois mil setecentos e trinta e oito que também está atribuído a uma carbonila... mil quinhentos e noventa e oito e mil quatrocentos e cinquenta e cinco temos uma ligação aqui... interpretada como a ligação c dupla c do carbono aromático... bom... eu particularmente não chegaria a essa estrutura só com o infravermelho... essa técnica é muito boa pra você identificar grupos funcionais/ essa é uma banda característica de carbonila ((apontando para o espectro))... então eu diria... na molécula a única coisa que diria... bateria o olho ((no espectro)) e diria que na molécula tem uma ligação c dupla o... nas técnicas de elucidação estrutural... no caso... RMN de carbono e de hidrogênio... são boas informações... espectrometria de massas... dependendo da molécula também dá ótimas informações... e claro/ casar com infravermelho que ele dá os grupos funcionais e pode dar a posição desses grupos dependendo do espectro.... o RMN dá a posição do hidrogênio e a posição do carbono que fica mais fácil de identificar ... é difícil dizer a estrutura olhando uma única técnica...

precisaria casar pelo menos três... eu gosto de usar o infravermelho... o RMN e o massas...

(...)

orbital é uma representação gráfica de uma distribuição eletrônica. Só que a gente vê essa distribuição pra um átomo só, né? Ela vale pro átomo de hidrogênio e depois a gente expande pra outros átomos, mas basicamente átomos com um elétron e um próton. Quando você diz que você tem uma imagem de um orbital, você tá fazendo uma imagem de algo que não existe. Orbital não existe. Existe é uma representação gráfica de uma equação...

(...)

Lemes: e a figura d é do s pro p... e comparando essa técnica... com a do infravermelho... a gente afirma que tem...sei lá... que esse é o estiramento... mas qual que é a diferença?

bom... essa técnica aqui eu não conheço... mas infravermelho eu conheço bem/ infravermelho você acertar um fóton... mesmo... na molécula... ela já está vibrando normalmente... e só queremos ver em que ponto ela vai emitir esse fóton de novo... então ela absorve fóton e depois ela emite... ela vibra... então você diz qual é essa emissão que tem uma vibração característica... essa vibração característica é de que? então você pega uma molécula padrão lá... você já sabe quais são as suas possíveis vibrações... se tem uma vibração de C dupla O... você tem uma vibração C-H... o que você tá vendo é uma técnica molecular... você está fazendo espectroscopia molecular.... quando você faz espectroscopia atômica... no caso das outras duas aqui... os efeitos quânticos são importantes na espectroscopia molecular... mas na espectroscopia atômica são muito mais importantes... são muito mais relevantes... então... uma coisa é você ver uma vibração de uma ligação química... outra coisa é você ver o orbital

Lemes: mas o que que... AH/ esse estiramento aqui é do C dupla O... mas alguém já viu o C dupla O?

ninguém viu o C dupla O/ no meu ponto de vista... tá você tem dois orbitais... pode chamar de orbital molecular... pode chamar do que quiser... vamos falar de orbital molecular porque dá uma distancia de ligação... que você tá medindo... no fim das contas... é a variação da distância de ligação entre dois átomos ou dois grupos... em um determinado espaço de tempo... você tá medindo... você não tá fazendo uma imagem disso... você está medindo a variação de distância de ligação... só isso... pra mim eu acho essa técnica bastante clara... eu não to vendo ali... uma ligação C dupla O ou uma C-O... eu to vendo variação de distância de ligação... a ligação C-O ela é bem mais fraca... tem uma vibração mais ampla...

do que uma ligação C dupla O... vibra mais rapidamente... mas num espaço bem mais curto

QA1

Lemes: agora é umas atividades mais recreativas... bom... então eu gostaria que você me falasse... qual que é a relação entre esse gráfico... a tabela e a molécula... são três formas de falar a mesma coisa? ou não... são diferentes?

é... na verdade... o que eu penso... sem analisar nada especificamente... esse aqui ((tabela)) caracteriza cada pico né? e juntando essas informações você chega na molécula

Lemes: isso é uma evidencia experimental? o que o infravermelho te dá?

na verdade é um quebra-cabeça né? cada pico você obtem um estiramento... e você consegue por meio desse estiramento... várias peças do quebra-cabeça e vai juntando uma a outra até chegar na figura desejada....

(...)

Lemes: sim... sim... continuando... se um aluno trouxesse essas noticias pra você... como você explicaria o que elas veiculam? o que ele mostra... o que ele traz de novo....

o que ele ((o 1º fragmento do artigo sobre orbitais)) tá mostrando? pra mim... uma descoberta científica... os orbitais d já existem e ele tá mostrando isso... trazendo ao mundo... provando que isso existe... os buracos d do átomo de cobre... e também mostrando a existência da ligação desse composto... muito legal isso...

Lemes: e esse outro?

mesma coisa... a partir daquilo que já existe... consegue mostrar... provar...

Lemes: você acha que essas técnicas aqui são iguais a do infravermelho?

se é a mesma informação?

Lemes: não mesma informação... mas esse aqui é uma técnica que mostra alguma coisa ((infravermelho))... essa aqui é uma técnica que mostra alguma coisa ((FEM))?

eu acredito que é a mesma coisa... trata a mesma informação... aqui você tem uma amostra e você obtém um espectro que você pode extrair informações... aqui também... você tem algo que se você colocar nessa microscopia eletrônica... você também consegue

extrair informações... tirar conclusões diferentes... porque são objetivos diferentes...

QA2

bom/ eu faço atribuição... então aqui já tem as tabelas... e tem na literatura livros sobre isso... você tem a onde você tem um sinal decorrente a um determinado grupo;;; Por exemplo aqui um grupo C dupla O... ele acontece aproximadamente em mil setecentos e dois centímetros a menos um.... então você pode chegar aqui ((espectro)) e vê setecentos e dois vai estar mais ou menos aqui... então você tem uma transmitância... então esse sinal aqui é característico desse agrupamento

Lemes: e como chega a esse? ((apontando para a representação da estrutura da molécula))
então você pode pegar o C dupla O aqui... então você tem esse agrupamento presente na molécula... e eu posso analisar os outros também que seria o aromático... aqui eu tenho um aromático monossustituído... que seria esse padrão né? então você tem um pico de transmitância aqui... recorrente a cada espécie... que faz a caracterização do composto...

(...)

aqui, né? Aqui já não, você tem como se fosse uma fotografia. [orbitais do raio x]

os dois tratam de... da parte de ligações químicas... mais específico... na parte de... teoria do... no caso aqui... de orbitais moleculares... é de uma certa forma... os dois na parte de estruturas cristalinas né? Então... de maneira geral... fala sobre... a estrutura eletrônica dos materiais

Lemes: mas falam aqui diretamente... um fala que é imagem do orbital atômico e o outro é uma direta observação dos orbitais...

são coisas bem diferentes... mas não sei se realmente se é possível...

Lemes: porque não é possível?

não... é possível né? Só que são técnicas bem específicas né? e normalmente... pra saber como que funciona... nossa... microscopia eletrônica de emissão de campo... o que realmente isso faz pra poder ver essa região... esse mapa da densidade eletrônica do material... eu não conheço né? aqui é difração de raio-x... combinados com feixes divergentes... raio-x para caracterização de material... é um dos mais utilizados né? aqui com feixe divergente... eu não sei como funciona... raio-x tem como você estimar a

localização de átomo a átomo... por parte de simulação você consegue calcular a distância entre-atômica... de certa forma você estima qual que é o tamanho de cada átomo... aqui você tem formação de buracos e tudo...

Lemes: então o que vocêalaria para o seu aluno? eles falam de orbitais que podem ser observados?

É/ pode ter dois tipos de análises com métodos diferentes... um você pode ter a observação e a outra você pode ter uma certa imagem do material...

Lemes: o que que diferencia a observação da imagem?

aqui... nessa parte... pelo que eu vi...

Lemes: do cobre....

é... aqui... "fomos capazes de produzir imagens diretamente de buracos no átomo de cobre"... então no caso aqui... foi por simulação né? e nesse caso aqui... imagem então é um dado experimental mesmo... aqui... através do dados experimental... você tem alguns dados que você pode colocar lá e simular e ter um mapeamento aqui né? tanto que forma o orbital aqui né? aqui já não... você tem como se fosse uma fotografia... ((orbitais do raio-x))

QO1

geralmente a carbonila... a faixa de vibração no espectro é de mil seiscentos e oitenta e vai até mil e oitocentos... ela varia conforme o tipo de carbonila né? a carbonila de aldeído... ela tem uma frequência um pouco menor... entendeu? agora... geralmente... quando tem carbonila de éster ou então carbonila de cetona que tem metilas... grupos doadores de elétrons... doando elétrons com a carbonila... as frequências ficam um pouco maiores... então é essa relação que eu associo... nessa faixa de carbonila de carbonila de mil setecentos e dois eu realmente eu diria que é uma carbonila de um aldeído né? Aí tem as vibrações fora do plano que seria... referentes a ligação C-H... C-H de aromático né? C-H de alifático né? mas C-H de aromático... geralmente cai aqui... o principal aqui na molécula... o bem importante seria o pico da carbonila né? porque do pico da carbonila a gente pode ter bastante informação... se é aldeído... se é cetona... depende da região que ela cai... e esses picos do espectros que diz se é aromático ou não...

(...)

bom eles utilizaram a ferramenta de raio-x ...experimento que dá dados da distribuição pra

densidade eletrônica e... fizeram uma comparação dos resultados com os cálculos que eles já tinham feitos... encontrados na literatura... mais dados que eles descobriram... pra ver o espaço de um orbital ao outro... pra deduzir que o cobre tinha uma ligação... formava dois cobres ligados... dois cobres estavam ligados... na verdade eles fizeram isso pra ver como que era a ligação... ligação do composto aqui (...) pra mim isso ((orbitais)) era bastante teórico... quando a gente estuda a parte de orbitais é muito teórico e com cálculo... com a tecnologia você pode provar a existência do orbital

QO2

Lemes: qual é a relação entre esse espectro de infravermelho... os dados da tabela e a molécula?

esse aqui é um espectro de infravermelho... um tipo de espectroscopia que nada mais é que a interação da energia com a matéria... tem vários tipos de interações... dependendo do comprimento de onda dessa energia... é um tipo de gráfico... é um tipo de interação e esse é específico do infravermelho... então basicamente é o que que esse comprimento de onda... o que essa energia do infravermelho consegue fazer na molécula... o que ele consegue é as mudanças em estiramento... aumenta a distância da ligação... diminui... girar a molécula... e essas coisas é colocada na forma de um gráfico... aqui por exemplo é um benzaldeído ((apontou para a representação da estrutura da molécula))... e aqui a gente pode observar o espectro do infravermelho deste benzaldeído né? e no composto benzaldeído... pode observar nessa tabelinha abaixo... ele seleciona alguns sinais específicos que absorvem a energia... então de acordo com o espectro né? carbonila... dois tipos de estiramentos de carbonila.. carbono aromático que é carbono S-P dois... e assim você consegue tirar informações sobre a molécula... obviamente não da pra definir uma molécula pelo infravermelho... mas tira informações e todas as informações são úteis né? e aqui tem um cálculo de índice de deficiência de hidrogênio.. que é um calculo que se faz pra saber o índice de insaturação... que ajuda também definir a molécula... quanto mais informações sobre a molécula... melhor...

(...)

nesse primeiro trabalho eu poderia dizer... ao meu ver... é a respeito da estrutura da molécula do óxido de cobre... e eles observaram algumas interações entre o cobre e o cobre e essas interações entre o cobre... os dois átomos de cobre... envolve orbitais d... essa observação de buracos... não me vem a cabeça o termo buraco... o que seria esse

buraco... mas deve ser um tipo de interação ou falta de interação... talvez... entre os dois átomos de cobre... isso mais envolvendo a questão atômica dos átomos... observando todos os efeitos de energia... distribuição eletrônica dos orbitais d e tal.... aqui tem uma tradução... ((lendo trecho do artigo da *Nature*))... então é isso... eles fizeram vários experimentos... como difração quantitativa de elétrons em feixe convergente... raio-x... mapearam a distribuição e densidade eletrônica... tudo no sentido de observar a estrutura do óxido de cobre... e esse aqui ((lendo o trecho do artigo do *Physical Review*))... então... o que eu pude entender nesse trabalho é que eles desenvolveram então... uma técnica... microscopia eletrônica nada mais é do que uma técnica pra observar estruturas... superfície de moléculas e eles desenvolveram uma nova técnica pra visualizar melhor essa superfície... definiria isso...

Lemes: dá a impressão de que eles falam que estão olhando realmente os orbitais...

é...

Lemes: você concorda com isso?

quem sabe eu lendo o resto do trabalho eu tenho mais informações... mas dá impressão que em ambos... têm até o desenho... colocam o desenho dos orbitais d... esse aqui o tipo do orbital D-Z dois se eu não me engano... dá pra entender que com certeza da pra enxergar os orbitais né? mas na verdade... quando a gente conhece o equipamento sabe que a gente não enxerga nada né?

Lemes: o equipamento traz o quê? o que você explicaria para o seu aluno?

na verdade o equipamento normalmente trás gráficos... ou seja... a interação disso com isso... o que acontece se eu aumentar a energia... o que acontece... e depois o tratamento desses dados é que nos fornece ideia de forma... energia... tamanho...

Lemes: vamos pensar... o orgânico... quando está pensando em impedimento estérico... a gente fala... AH/ o orbital ta impedindo estéricamente que reaja em tal parte da molécula.../ então é como se estivesse mesmo... existente o orbital...

sim... os orbitais têm lá... mas a visualização dos orbitais é que... vamos dizer... é algo ... até que muita gente nem gosta muito de estudar... exatamente por que é algo que tem que imaginar um pouco... tem que forçar a mente pra tu conseguir enxergar e tentar tirar uma ideia de como funciona... mas isso é tudo com base em estudos com equipamentos modernos... obviamente eles não fornecem as formas bonitas... são gráficos... muito matemático... mas depois a gente sempre tenta simplificar... ver o lado... assim... qualitativo

da coisa... por exemplo isso né? tem um impedimento estérico... tem um volume muito grande... uma densidade eletrônica muito grande que impede... e aí a gente tenta botar isso em uma maneira... tanto... quem fez o experimento... pras pessoas possam entender né? então esse é o ponto chave/ tornar aquela informação numa maneira mais acessível a todos né?

Q11

bom... procuraria identificar quais são as bandas aqui né? no infravermelho... no espectro... e relacionar com qual ligação ele tá relacionado... por exemplo a mil setecentos e dois... que é a mais pronunciada... e que seria o estiramento do C dupla O né? se eu não soubesse qual é essa molécula... sei o número de carbono... oxigênio e hidrogênio... então eu sei que... eu já sei que um dos carbonos está ligado com esse oxigênio... aí só sobraram seis carbonos e seis hidrogênios... aí eu tentaria relacionar outras formas... quais são os mais pronunciados aqui também né? têm umas hidroxilas nessa região ((apontando pro espectro))... geralmente... e aqui não tem... três mil e sessenta e quatro com o carbono s-p dois... a dupla carbono... AH/ já colocou tudo aqui/ não tem graça/

Lemes: o que que tudo isso representa? o que esse espectro significa?

ele ((o infravermelho)) representa os tipos de ligações e como elas estão se comportando quando elas são estimuladas pelo infravermelho... no caso... e com isso dá pra saber de que forma elas estão ligadas

(...)

tentar apresentar não como a foto do átomo né? mas são representações que são feitas no microscópio e que são teorias de que como seria o átomo né? são teorias aceitáveis hoje né? não necessariamente são as definitivas....

Lemes: mas se você pega a tradução literal... eles falam que é observação direta dos buracos dos orbitais d... o que você falaria pro aluno?

É/ ele tá observando uma imagem que ele obteve através de uma técnica ... ninguém tá enxergando o átomo...

Q12

de tipo de ligação né? se simétrico ou assimétrico... se ela é.... um tipo de estiramento né? ou é a questão da vibração da molécula né? tesoura todo aquele...

Lemes: todo o movimento que a ligação possa fazer...

isso... isso... aí tem algumas que são... as que aparecem são transmissões permitidas né? têm algumas que são proibidas que podem aparecer em outra... tipo... no Raman né? ela é proibida no infravermelho e aparece no Raman...

(...)

bom... a descoberta científica... depende muito do que a comunidade... quem tem que definir isso é a própria comunidade científica... no passado existiram pessoas que descobriram coisas brilhantes e demoro muito tempo pra ser reconhecido né? tem que ter uma comprovação... depende do que a comunidade...pode não ser aceito hoje e em vinte anos ser aceito

Lemes: mas VOCÊ/ um exemplo do seu doutorado... você faz descobertas científicas?

não... eu acho que...na verdade... eu trabalho mais com modificação...na verdade... as propriedades desses compostos que eu estudo... já existem entorno de vinte anos no grupo... a diferença que eles faziam só um complexo e na verdade eu to fazendo um polímero com esses complexos... então as propriedades básicas deles... já se conhecem a parte de espectroscopia... a parte de eletroquímica...

(...)

eles utilizaram um método físico... difração de raio-x... e na verdade fizeram... existe um programa computacional que tenta relacionar o método físico.... eu acho que... é uma interface entre o raio-x e química computacional... pegam essas substâncias e tentam calcular... tem um programa computacional que faz essas formas de orbitais... e essas formas de orbitais também... a gente tá acostumado com essas formas que aparecem... mas é para o átomo de hidrogênio... para outros... que têm mais elétrons... não tem aquela forma que a gente tá acostumado... e quem faz isso aí é o químico teórico... que faz esse tipo de análise... sai fora do meu... eu não mexo com química computacional... e raio-x também... eu não faço raio-x né?

Lemes: e essa de microscopia eletrônica de emissão de campo?

eu desconheço esse tipo de técnica né? porque até então... essas formas dos orbitais eram muito teórico... não sei se agora tem um equipamento que pode realmente enxergar aquela

forma... têm algumas técnicas de espectroscopia AFM de força atômica... que a agulha chega ser tão fina... da dimensão de alguns átomos assim... então você consegue mexer... você consegue escrever um nome... mover átomos/ escrever uma letra com átomos com essa microscopia de força atômica aí...mas eu não conheço bem a técnica...

QBQ1

primeiramente a gente vai ter picos aqui... no infravermelho... então são esses números e a frequência... e o pico máximo foi medido no eixo x né? e ao longo dessa frequência você está vendo os picos de transmitância e cada um desses grupos na molécula... eles vão ter uma transmitância... na região do infravermelho... diferente... por que os elétrons entre esses átomos vão estar dispostos de uma forma diferente... se você tiver uma carbonila... se você tiver um C-H... eles vão estar transmitindo em um comprimento de onda diferente... então se você conhece quais são os picos que emite essa transmitância e uma tabela... você vai poder saber que cada pico desse correspondente a um ambiente químico dentro dessa molécula... então você vai saber que um pico tá relacionado a uma carbonila em um mesmo carbono... se a carbonila tá ligada a um hidrogênio

Lemes: como eles chegaram do gráfico para a molécula?

com certeza eles partiram de moléculas mais simples... que eles conheciam o grupo funcional... e aí eles foram desmembrando os picos e aí eles puderam partir desses picos simples e analisar gráficos mais complexos e apontar/ essa transmitância cai... esse comprimento de onda é característico... no infravermelho... nesse grupo... então você tem uma carbonila e essa carbonila é ligada a um próton... a um hidrogênio... ele tem essa característica... agora ao invés de um próton... ele estiver ligado a um cloro... ele vai ter outra característica... se tiver transmitância no infravermelho porque têm grupos que não contém

(...)

usando uma técnica modificada de raio-x... o que eles estão vendo... na verdade... é densidade eletrônica né? e daí quando a gente fala assim dos orbitais... nada mais são do que... a definição de orbital que é a probabilidade de você encontrar um elétron naquela região ao redor do núcleo do átomo... nada mais é... do que densidade eletrônica/ tem regiões mais prováveis... provavelmente você vai ter uma maior densidade eletrônica em determinado instante... que você tira uma foto... então quando você enxerga... por exemplo... uma figura parecida com essa... você tá vendo uma molécula de óxido de cobre...

nada mais é... do que tirando uma série de fotos em instantes... e vendo qual a densidade de elétrons ao redor dessa molécula e conseguir diferenciar quais elétrons são provenientes de orbitais atômicos e quais são de orbitais moleculares... ou seja... são elétrons compartilhados daquela molécula... então... quando eles falam desses orbitais... nada mais é do que a densidade eletrônica... que é ou não compartilhado entre esses átomos dessa molécula... isso que eu explicaria em termos rápidos e leigos... eu sou da opinião de que em termos didáticos... é sempre interessante você explicar a metodologia usada... então se ele sabe como funciona esse tipo de difração de raio-x e ele entende... mesmo que for o princípio dessa técnica... ele já vai entender o fenômeno que ele está observando... então eu... por exemplo... não conheço... então não posso explicar... mas se eu vou explicar um ponto... um tópico... que eu quero que o aluno entenda... eu não vou falar/ ah/ isso é densidade eletrônica... ponto...

QBQ2

Lemes: na sua opinião/ o que os químicos mais fazem? uma coisa assim... que pra ser químico... a pessoa faz... pensa... uma característica do químico

raciocínio abstrato... primeiro raciocínio matemático...

Lemes: mas o físico também tem raciocínio matemático...

AH TÁ... seria só do químico... também teria um pouco no físico... físico nuclear... a capacidade de abstração... porque no fundo a gente está falando o tempo inteiro de coisas que a gente não vê/ então a gente tem que ter fé... tem que acreditar que o átomo é daquela maneira... é um tanto de fé e um tanto de abstração... se você conseguir pensar aquilo direitinho e pensar que isso realmente pode acontecer ou... a minha visualização três-d é horrível... então pega aqueles complexos que são assim e assado... e você fica com as canetas fazendo assim e assim... então eu acho que a capacidade de abstração é muito importante...

(...)

Lemes: o que essas informações representam pra você.... então qual que é a relação entre esse gráfico... essa tabela e a estrutura...

esse é um espectro de infravermelho... acredito eu... que dessa substância... pelo que da pra ver... a primeira coisa que eu faria se me dessem isso é/ mil setecentos já sei/ carbonila/ é o que a gente mais sabe de cor e com essas informações ((tabela)) fica muito

fácil atribuir... fica muito fácil decifrar o que tem aí...

Lemes: e o que seria a técnica? o que ela te dá de informação?

ela ((a técnica de infravermelho)) me dá de informação das vibrações das ligações de cada átomo... aliás... entre cada átomo... a vibração e de certa forma o movimento que elas fazem... aí dá pra discernir o estiramento da deformação... o normal seria vir isso aqui pra você ...o espectro e se vira/ principalmente no meu caso que é produtos naturais... a gente tem uma noção do que vem... porque eu trabalho com produtos naturais específicos... que são fotoprotetores com uma estrutura determinada então uma série de ligações... estiramentos... enfim... eu ia saber por que essas coisas são pré-determinadas... mas eu vou precisar definir o substituinte... então... no meu caso... provavelmente várias coisas eu ia cortar/ AH/ esse eu sei qual é... esse eu sei qual é/ tudo bem.... e aí eu só ia trabalhar com as bandas novas pra mim.... e aí eu ia cair numas regiões de pandemônios... aquelas regiões que tem um monte de picos... que podem ser um monte de coisas... então a partir de um infravermelho é muito complicado você falar/ AH/ essa molécula é essa/ eu trabalho mais com espectrometria de massas... que é... ao meu ver... a técnica espectroscópica... espectrométrica mais fácil de todas... na verdade eu sentiria mais confortável com outros espectros juntos... então se eu tivesse o infravermelho e o RMN e alguma outra coisa pra interpretar... pra ir montando essa molécula... só infravermelho é pouca informação...

(...)

Lemes: compreenderem o que? o que está acontecendo?

provavelmente eles mapearam... conseguiram mapear a distribuição eletrônica do óxido de cobre... compararam com o teórico... enfim... usando duas técnicas... essa de elétron de feixe convergente eu não sei... eu não conseguiria explicar pra ninguém... ia ser um daqueles casos de ...beleza/ semana que vem eu explico pra vocês... (...)

Lemes: e esse aqui de microscopia eletrônica de força... de emissão de campo?

eu tô imaginando minha mãe lendo esse texto... que legal/ eu ia começar falando que essa é uma técnica mágica... por que a gente tá começando a conseguir ver os átomos de verdade... enfim... a gente tá começando conseguir ver a distribuição eletrônica que faz a gente acreditar que os átomos são daquele jeito mesmo... e que bom... se eles são alunos de graduação eu espero que eles saibam orbitais s e orbitais p... eu ia gostar bastante disso... eu não sei... olha professora/ orbital s... orbital p/ olha existe/ tá vendo?/ são dados de microscopia que aparentemente provam que existem... então não precisam mais

desconfiar de mim

Lemes: e porque aparentemente?

não sei... porque eu acho muito forte você dizer que prova alguma coisa... principalmente ultimamente ... então... são dados que pra mim... pra mim eles provam... tipo/ olha/ existe/ legal/ mas eu não sei... ultimamente eu tenho ficado de pé atrás com tudo... então...

Apêndice 2 – Trechos das falas dos doutorandos distribuídos nas categorias e subcategorias¹⁹

1. CARACTERÍSTICAS DA ÁREA DE ATUAÇÃO DA QUÍMICA

1.1. PRESENÇA PROFISSIONAL NO SETOR PRODUTIVO

QA1 –

QA2: *noventa por cento que a gente faz aqui nunca vai ser aplicado em nada/ mas... a gente brinca de ser cientista no Brasil... na verdade a gente não faz muita coisa aplicada no Brasil... é diferente quando você pega as universidades lá fora/ que realmente você pega um problema da indústria e resolve na universidade... aqui não tem muito disso... então realmente você tem uma problemática e tenta chegar numa certa solução*

QBQ1: *já/ trabalhei com físico-química... microscopia Raman... trabalhava com espectroscopia... basicamente... depois eu fui pra bioquímica direto... eu trabalhei com Schistosoma mansoni... um verme e depois eu fui trabalhar na indústria... daí eu trabalhei com analítica... bastante com analítica... com quimiometria... com análise de traços de agrotóxicos em amostras vegetais... então três coisas diferentes uma da outra*

QBQ2 –

QF1: *talvez assim... na época ((do vestibular))... na minha cabeça... eu tinha ideia que tipo... a química eu vou ter mais chance de conseguir emprego depois de formado... acho que na física não e química eu teria... daí eu acabei ficando em química*

¹⁹ Os trechos das entrevistas alocadas nas categorias, onde em *itálico*, trechos *da primeira entrevista* e em **negrito**, trechos **da segunda**.

QF2: eu gostava mais de física mesmo... apesar de não ter um campo de trabalho descente né? mas a química não é lá grande coisa né? mas é bem melhor do que da física... mas a questão de gostar mesmo da física do que de gostar do curso em si... quando a gente tá no ensino médio a gente não tem nem noção do que vai encontrar na universidade

QI1 –

QI2: ((o meu vizinho)) contava sobre o que ele fazia ((trabalhava na indústria))... e aí depois como ele contava assim... depois eu ia bem na escola ele meio que me ensinava... aí foi isso que me motivou ((a fazer química))...

(...)

QI2: o pessoal tem muito essa característica do químico no laboratório... mas hoje em dia o químico... principalmente quando vai pra indústria... uma coisa que eu gostaria de falar aqui... por que eu acho que a pessoa na universidade é muito influenciada ir pra carreira acadêmica... muito eles não tem a mínima experiência... os próprios alunos da pós aqui... ingressam pra fazer mestrado... doutorado ou até mesmo doutorado direto e o que acontece? a pessoa forma na USP... faz doutorado aqui e vai dar aula USP... não tem concepção... nunca trabalhou em outra coisa... e na indústria é bem diferente ((da academia))... muitas vezes o químico... ele inicia na indústria no laboratório... mas depois vai trabalhar na parte administrativa... acontece muito isso... (...) vi a palestra de um cara da criminalística que... pelo fato de ele ter doutorado em orgânica... ele era uma pessoa diferenciada lá e aí hoje ele é diretor do instituto de criminalística da Polícia Federal... ele já não mexe mais em laboratório... ele trabalha mais na parte administrativa... e com o conhecimento que ele teve no doutorado... ele pôde comprar equipamentos de última geração... porque ele entende das técnicas né? então... antes que os laboratórios tinham poucos... tipos de procedimentos... experimentos muito ainda arcaicos né? ele conseguiu inovar colocar equipamentos modernos... espectrometria de massas... RMN... equipamentos de última geração... então interessante a palestra que ele deu... tem gente que trabalha na parte comercial também... tem outros segmentos

QO1: na verdade eu comecei gostar de química no cursinho... durante o ensino médio eu nem pensava em fazer química... eu queria fazer biologia... eu vi que em química... que eu podia ter muito mais possibilidade de emprego talvez... mais do que em biologia... biologia é mais restrita a pesquisa ou a lecionar... química você tem como lecionar ou trabalhar na indústria ou você partir pra pesquisa... então por isso que eu escolhi... e eu comecei a gostar mesmo e ter afinidade no cursinho

(...)

QO1: eu nunca tive experiência com polímeros... na graduação eu comecei a fazer pesquisa na parte de bioquímica... com alimentos... entendeu? pesquisava atividades oxidantes e não oxidantes de alimentos... e quando eu tive que fazer estágio... eu tinha que fazer estágio em indústria ou estágio em outra instituição de ensino que não fosse a que eu tinha feito graduação... aí como o nosso grupo... tinha uma pessoa que conhecia o professor C. ... tentei procurar estágio na indústria e não consegui... então eu comecei fazer na USP/ aí como eu tinha esse contato e conheci o professor... aí ele me deu um projeto e desenvolvi durante seis meses e um pouquinho... aí acabei me interessando em ficar no laboratório... prestei a prova da pós-graduação e entrei aqui/

QO2 –

1.2.APLICAÇÃO PRÁTICA

QA1: é porque... na verdade... eu comecei a fazendo iniciação científica nessa área né? e eu sempre pensei muito na parte dos laboratórios... porque eu queria uma coisa mais aplicada a sociedade... não em si ... só a estudar química... química pura e não aplicar nada na sociedade... e aí eu sempre gostei muito dessa parte de análises clínicas relacionada a farmácia... eu vou partir pro lado mais aplicado da química

(...)

QA1: não... eu já comecei na química analítica... tentando... nesse sentido... tentar unir a universidade a sociedade... foi basicamente isso... eu pensei ...vou desenvolver métodos analíticos para resolver problemas da sociedade...

(...)

QA1: (...) é o que eu acho também... por exemplo... já me perguntaram... porque precisa saber orbital molecular... e eu tenho dificuldade pra responder isso... o que essas grandes teorias... teorias pesadas atrás da química... o que ela pode me ajudar a resolver problemas sociais? será que não é uma perda de dinheiro público? que é o que me questionaram...

Lemes: como você definiria descoberta em ciência?

QA2: atualmente é algo aplicável

Lemes: como assim? por exemplo...

QA2: ajudar... de uma certa forma... a sociedade em si... isso pra mim é uma descoberta

(...)

QA2: busco... busco propor algum mecanismo... como que ocorre a passagem de compostos através da camada lipídica... isso pode ser utilizado para o desenvolvimento de novos fármacos... por exemplo

(...)

QA2: noventa por cento que a gente faz aqui nunca vai ser aplicado em nada/ mas... a gente brinca de ser cientista no Brasil... na verdade a gente não faz muita coisa aplicada no Brasil... é diferente quando você pega as universidades lá fora/ que realmente você pega um problema da indústria e resolve na universidade... aqui não tem muito disso... então realmente você tem uma problemática e tenta chegar numa certa solução

(...)

QA2: toda parte que eu estudo de materiais... tem uma conexão muito grande entre as duas né? dependência... uma boa parte... a física experimental é uma área bem ligada a química né? você tem fluidos complexos né? você tem que ter um conhecimento legal de química pra fazer... assim como a física... que vai trabalhar com a química... vai aplicar algo que eles desenvolveram... vai ter que ter o conhecimento da física de como funciona aquele sistema que eles propuseram... e aqui a última.... fala sobre a dificuldade na parte teórica né? que é uma coisa que eu enfrento bastante também

QF1: (...) eu fiz um trabalho que o sistema era uma reação que acontecia na atmosfera de Titã que é uma lua de Saturno e foi um trabalho interessante...então eu acho que na verdade foi o trabalho mais legal que eu FIZ/(...)

QF2: a área de pesquisa do doutorado foi basicamente a mesma do mestrado... então eu foi só uma sequência... eu escolhi essa área porque é uma área interessante né? química ambiental... a gente tá começando aqui o de química ambiental então é importante fincar uma bandeira numa área nova... não tão nova... mas tava se iniciando no instituto... e trabalhar com química de modo geral aplicada... eu acho bastante interessante/ a parte de química básica... o desenvolvimento de teoria é muito importante... mas a aplicação eu acho muito mais necessária...

QI1: então... é porque eu gosto muito de uma pesquisa que eu consiga ver alguma coisa... nem que seja num futuro muito distante... mais que é aplicado né? nosso laboratório aqui... que a gente trabalha pro professor B. é de bioinorgânica... então eu trabalho com alguns compostos metálicos... química teórica... síntese de complexos... mas sempre aplicado pra alguma área medicinal... (...)

QI1: *sim... eu acho que esses dois representam descobertas na ciência... tanto os que trabalham com a química de partículas aqui... química de partículas e desenvolvimento de novos elementos... quanto esses que trabalham com aplicação né? descobrimento de novas aplicações pros catalisadores... no caso...*

QI2: *desafiadora porque eu não sei... se trabalha com síntese... é uma incógnita... eu não sei o que vai dar... embora... depois você tem que estudar as propriedades desses compostos... então... se eu soubesse que fosse dar... não precisaria fazer/ e também... quando tem aplicação... não sabe se vai dar certo.... acha que é uma coisa na teoria... você imagina... mas depois você vai fazer a aplicação... não é bem assim/ não dá... não chega... por exemplo... eu vou fazer uma síntese... por exemplo... no papel... é tudo muito bonitinho... mas não dá cem por cento... as vezes dá dez por cento e aquele que é o rendimento... então tem que ir pra parte prática... desafios né? (...)*

Lemes: *como seria uma descoberta na sua área?*

QI2: *vou dar um exemplo... a cisplatina... eu acho que é um dos únicos anticâncer que usa metais... a cisplatina é um complexo quadrado planar de platina com dois cloros e duas amônias no complexo... e ele... na verdade... estudou porque... o cara tava tentando estudar cultura de bactérias com eletrodos de platina... ele viu que... na verdade... é que esse eletrodo né? como na reação lá... formou... como tinha amônia no meio... formou a cisplatina que inibiu a proliferação de bactérias... aí depois que foram utilizar para... na verdade... essa cisplatina se liga no DNA tendo uma distorção né? por que como são dois cloros e duas amônias... os dois cloros são lábeis... então eles se ligam na base do DNA e a amônia é inerte né? então acaba tendo uma distorção... que a própria enzima que faz a divisão da molécula de DNA não reconhece mais a molécula... porque tem uma geometria correta pra isso né? Então é isso... ele não sabia... ele nem imaginava... e tempos depois que descobriu aplicação (...) primeiramente é o seguinte: é estudado um composto novo, na química... e muitas vezes, essas propriedades não se sabe a aplicação. As vezes no início não tem muito interesse... o que que seria a aplicação? E depois que vai ser descoberta as aplicações... muitas coisas acontecem assim na química.*

QO1: *(...) hoje em dia a química tá tomando uma proporção que ela pode estudar qualquer substâncias que o nosso corpo produz ... justamente para um biólogo... o estudo dessas moléculas que estão no meio biológico... ela precisa da molécula pra chegar lá... hoje em dia a gente tá conseguindo fazer pele artificial... até célula artificial... produzir no laboratório um neurônio... e como a gente trabalha com materiais poliméricos... o nosso foco é... restituir alguns tecidos vivos... fazer coisas pro próprio corpo mesmo... estudo até de coração artificial... então é uma... realmente pode ser que sim*

QO2 –

1.3. DESENVOLVIMENTO DE NOVAS FORMAS DE EXPLICAÇÃO

QA1: (...)mas eu ainda acho que o mais interessante... em termos de descoberta da ciência... descoberta... no sentido de descobrir o que já está aqui... e explicar e trazer a tona... não no sentido de desenvolver ou sintetizar... eu acho que as coisas já existem e a gente nada mais mostra o que já está aqui (...)

Lemes: (...) na sua opinião... você acha que se a física não avançar a química também não avança?

QA1: pensando nesse lado não... eu concordo que ela ((a química)) avança independente...

(...)

QA1: (...) eu concordo que eu não preciso pegar um livro de química quântica pra fazer a minha pesquisa... entende? eu acho que nesse sentido... não... agora... por outro lado... a biologia... por exemplo... ela não consegue explicar um metabolismo sem química... aí podemos dizer... a biologia é uma sub-área da química... química e física andam juntas... mas não se substitui uma pela outra...

QA2: busco... busco propor algum mecanismo... como que ocorre a passagem de compostos através da camada lipídica... isso pode ser utilizado para o desenvolvimento de novos fármacos... por exemplo

QBQ1: (...)eu descobri que essa proteína... ou essa molécula... se comporta diferente em determinada concentração de prótons... de hidrogênio na solução... é importante pra mim... só que talvez só isso sozinho... isolado... não seja de grande valia... então uma descoberta... ela é importante... quando ela tem uma conexão entre várias descobertas e isso forma um arcabouço teórico... que você possa explicar um fenômeno... (...)

QBQ1:(...) a hipótese era que ela favorecia a célula a se dividir... ela ((a proteína)) ajudava a célula a se dividir e por isso ela tava lá... era um acessório importante... e eu modifiquei essa proteína... com intuito de aumentar a concentração dela dentro da célula e dê o efeito dela ajudar a célula a se dividir mais ainda... só que o que eu observei foi o contrário... ela começou a prejudicar a divisão... ela não deixava a célula a se dividir... então foi uma descoberta pra mim... inesperada... ela tinha duas condições... ela podia ajudar e pra atrapalhar... ela tinha dois caracteres... então esse foi um tipo de coisa que meu modelo não compreendia... e eu tive que começar a inserir essa variável dentro do meu modelo/ como essa proteína... que tava modificada... ela funciona diferente... e isso ajuda entender todo o mecanismo global... é um tijolinho dentro de uma parede e depois... às vezes eu vou construo uma parede e vê que ela tá ficando torta...(...)

QBQ2: (...) eu acho que tudo é uma descoberta científica... se eu tô no meu processo de extração e descubro que.. na verdade... um solvente é melhor que o outro... é uma descoberta científica... pode ser a descoberta mais relevante do mundo... mas é uma descoberta científica... a medida que vai me ajudar a prosseguir na minha ciência... à medida que se eu ficasse presa no outro solvente... eu não ia conseguir resultados tão bons... enfim/ então... de certa forma... todo pequeno passo que você dá... eu acho... na sua pesquisa... é uma descoberta científica/(...)

Lemes: na questão da sua fala... que você diz “eu não ponho a mão na massa a muito tempo” e uma outra que refere que você não esta no laboratório... como se fosse que o químico a referência dele maior seria o laboratório... uma pergunta que ficou é que se na sua pesquisa se você precisa de dados experimentais pra você fazer seus cálculos teóricos?

QF1: não... é que assim... química teórica existe uma série de coisas que se pode fazer... no meu caso a gente faz cálculos que a gente chama de ab-inícios... que é exatamente isso daqui... é resolução aproximada de Schrödinger para obter alguma coisa... uma resposta... então você pega o sistema que você quer trabalhar... uma molécula... e resolve a equação de Schrödinger... isso se chama cálculo ab-inicio que a gente fala né? ou seja... um cálculo que realmente... é calculo de primeiros princípios... ou seja... você não precisa de dados nenhum né? nenhum dado experimental... claro a gente compara depois... por exemplo... se você tem algo experimental pra essa molécula... você compara e se você fizer a resolução da equação de Schrödinger for bem aproximada... você consegue respostas e você pode falar ...não... é assim/ isso chama cálculo ab-inicio que é o que a gente faz

QF2: o químico trabalha o estudo das transformações da matéria né? como produzir novos produtos e como entender como esses produtos interagem com o meio e com outros produtos químicos

(...)

QF2: descoberta... bom... é difícil descobrir algo novo... a química quase tem 300 anos né? mas uma descoberta... primeira coisa... ela tem que ser algo novo... não necessariamente um produto... pode ser uma ideia... pode ser uma teoria... pode ser uma redescoberta... uma releitura de uma teoria... ou um novo conceito/ então a descoberta... ela é algo que gera um conhecimento futuro... basicamente... baseado em conhecimentos posteriores... (...)

QI1: algo que traga alguma novidade pra alguma área que já estava sendo desenvolvida... não necessariamente algo que vai revolucionar o mundo... mas por exemplo... AH/ eu descobri que tem uma molécula que ela é antioxidante... mas depende né? num nível tal é oxidante... mas em outro ela pode fazer mal... então isso é uma descoberta né? é o passo a passo da ciência... todo dia a gente dá um passinho pra frente

 Q12 –

QO1: eu acho assim... como a tabela periódica é uma coisa universal pros químicos... então qualquer coisa que você... essa descoberta... no caso... ela tem o impacto talvez maior... porque a tabela periódica é uma linguagem que todos os químicos utilizam então essa é uma descoberta científica... de grande impacto... agora... o que eu tô vendo aqui ((artigo sobre mecanismos de reações orgânicas))... esse tipo de descoberta é mais restrita pra determinadas áreas... entendeu? tá vendo? paládio... metal de transição... metal pesado... então talvez esse daí... essa descoberta é importante e tal... claro/ mas talvez é mais interessante pra alguém que trabalha com isso... entendeu?

Lemes: mas como você definiria descoberta? a partir das duas notícias...

QO1: descoberta... você.... é encontrar algo novo... algo novo e que seja... que revolucione a ciência... que revolucione tudo aquilo que foi estudado

Trecho do parágrafo escrito:

(...) químicos orgânicos sintéticos desenvolvem continuamente tecnologias para tornarem as carbonilas mais reativas com o uso de catalisadores que se complexam a ela tornando-a mais reativa, cálculos teóricos também mostram uma melhor distribuição eletrônica na carbonila com o uso de catalisadores.

 QO2: não/ por impacto... em termos de maior credibilidade... como eu disse... é o JACS... só que... pelo título do trabalho... eu acho que esse aqui se caracteriza melhor como descoberta... que fala de Mendeleev algo antigo... descoberta de um novo elemento algo que não acontece todo dia... a descoberta de um novo elemento... ou a possibilidade de descoberta... enquanto que... esse tipo de pesquisa ((artigo sobre mecanismos de reações orgânicas)).. sempre vai ter informações... qualquer coisinha que se faz diferente é algo que se pode publicar

(...)

QO2: na minha opinião... pros químicos eles não observam o átomos em si e sim um todo... mas sempre na possibilidade do que a gente pode fazer com essas moléculas que eu conheço... que eu já trabalhei... que eu tenho informações sobre elas... conhecimento dessas moléculas... o que eu posso utilizar delas... as vezes até poderia pensar melhor... ou até tirar melhor proveito se eu conhecesse bem as peculiaridades dos átomos... de cada átomo... pra que que serve... no entanto eu acho que o conhecimento das moléculas... que eu penso mais como tirar proveito desse conhecimento... muitas vezes não tem

uma finalidade... meu proveito é mais próprio do que realmente é um conhecimento útil pra população e tals... mais tirar conhecimento que tenha proveito pra ele... pro químico mesmo...

1.4. INTERFACES COM OUTRAS CIÊNCIAS

QA1: não existe fronteira.... não existe empecilho para que chegue a coisas inovadoras né? ((comentário da próxima frase)) o que eu entendo aqui é que é uma coisa que a gente já tá vendo né? hoje as coisas são muito mais interdisciplinares do que no passado né?

(...)

QA1: né... essa aqui no sentido de que não existe fronteiras ((apontando para o trecho de Oparin))... e é onde tá caminhando... nesse sentido mesmo... e essa aqui em termos de interdisciplinaridade ((apontando para o trecho de Heitler))... que a coisa não tá mais só em estudar por estudar... coisas separadas... nesse sentido

(...)

QA1: sabe por que? é daí que eu quero falar... porque eu acho assim... a química inorgânica entra quando a química orgânica não consegue explicar o que a química inorgânica explica... então... vamos dizer assim... a química orgânica precisa da química inorgânica por causa dos orbitais... certo? Aí... a gente pensa assim... a química precisa da mecânica quântica pra poder explicar porque que a água é líquida... então a química é uma sub-área da física

Lemes: (...)na sua opinião... você acha que se a física não avançar a química também não avança?

QA1: pensando nesse lado não... eu concordo que ela ((a química)) avança independente...

Lemes: se falar que todos esses cálculos estão errados... vai fazer alguma diferença na química?

QA1: mas por outro lado... eu acho que ela avança porque existe uma base muito sólida da física... eu acho que se não tivesse a física... e toda essa parte da mecânica quântica... a química não teria evoluído... então por isso que eles defendem a sub-área... não que me agrada falar isso... não me agrada falar isso... mas eu acho que tenho que concordar... hoje ela sobrevive sem a física... mas nos primórdios não... se nos primórdios ela dependeu da física eu acredito que ela pode ser considerada uma sub-área... acho que mais uma dependência do passado... não hoje... eu concordo que eu não preciso pegar um livro de química quântica pra fazer a minha pesquisa... entende? eu acho que nesse sentido... não... agora... por outro lado... a biologia... por exemplo... ela não consegue explicar um metabolismo sem química... aí podemos dizer... a biologia é uma sub-área da química... química e física andam juntas... mas não se substitui uma pela outra...

QA2: é... aqui ((na química)) você tem o diferencial que você pode ver todos os lados... a gente pode pegar vários problemas que tem na física e na biologia - que eles não conseguem resolver -- e a gente consegue contornar alguns problemas que tem na parte de síntese... parte de análise.... essa característica multidisciplinar né?

QBQ1: então... eu sempre gostei da visão molecular... de mecanismos moleculares que a ciência mostrava... e eu sempre gostei disso relacionado a como as coisas vivas funcionavam... então na verdade eu escolhi química... porque eu achava que era o curso que ia me ensinar como enxergar e entender as moléculas... e eu escolhi o Instituto de Química aqui porque tinha um departamento de bioquímica muito forte já... então dei sorte de não mudar minha cabeça com o tempo

Lemes: então você já escolheu a área do doutorado...

QBQ1: quando eu escolhi a graduação... já era muito direcionado... já era meu interesse estudar química dentro da biologia

QBQ2: desde criança eu falava que eu ia prestar biologia e aí... eu fui percebendo que eu gostava de biologia... mas talvez não tanto assim... porque a parte taxonômica... classificação de plantas... aí eu fiquei perdida... comecei a pensar em oceanografia... biologia marinha... mas eu gostava de genética também... e aí meu professor de biologia falou que pela química eu podia ir pra genética... porque eu tava achando que... por todos esses lugares que eu fosse... eu ia ter uma falta de números... porque eu sou uma pessoa de exatas... querendo ou não... biologia tem pouco número... e ele falou que pela química eu podia ir... aí eu / AH/ tá bom... e de repente química virou minha única opção

QBQ2: teria que ser uma alga... com certeza... uma macroalga né? que são as algas visíveis... porque uma micro nem tem graça direito... embora eu trabalhe com elas... vistoso não é né? então tem que ser uma macroalga... eu não sei... dentro de uma gota para simbolizar extração... eu não sei direito... puxa/ eu nunca pensei nisso/

QBQ2: (...)não gosto dessa redução da química a física...acho que nenhum de nós acha... na verdade... concordo que a física e a química andam estupidamente conectadas... (...)

QF1: (...)a química é muito ampla... pra ser só um ramo da física... e hoje eu acho que... em alguns pontos... elas estão muito conectadas... () determinar a mecânica quântica nos interesses químicos... que é justamente o que diz essa frase... mas não...

QF2: (...)a química se baseia nas leis da física... mas as leis da física são difíceis de aplicar à química... por causa dessa grande dificuldade de entender... de aplicar as equações a compostos maiores

QI1: (...)nosso laboratório aqui... que a gente trabalha pro professor B. é de bioinorgânica... então eu trabalho com alguns compostos metálicos... química teórica... síntese de complexos... mas sempre aplicado pra alguma área medicinal...(..)

QI1: eu acho importante essa ideia aqui... pelo menos nesses dois está mais explícito...três últimos exemplos... a ideia de relacionamento entre toda a ciência... eu sou químico bioinorgânico... mas e daí? eu tenho que saber físico-química... tenho que saber orgânica... tenho que saber bioquímica... tenho que saber física... matemática então acho que não dá pra separar em classes assim... então eu sou isso e só sei disso/ não vou saber de mais nada/ então aqui fica bem claro quando ele fala que a química e a física se fundiram... então é isso

(...)

QI1: pra nossa área... seria a hemoglobina... ela tem o que a gente quer... tem a parte biológica ali... mas ela só funciona porque tem um ferro lá dentro... ela tem um metal... no estado de oxidação dele lá... então... acho que seria um símbolo...

QI2: (...)((química)) é uma ciência básica também né? você pode relacionar com outras também... com biologia... com outras...

(...)

QI2: eu acho que é diferente porque a química estuda os compostos químicos... as propriedades dos materiais... o físico também estuda isso aí... eu acho um pouco difícil de definir... porque hoje tá tão relacionado... esse cruzamento de áreas que fica um pouco difícil de especificar o que que químico... porque lá também tem... no meu laboratório... tem gente formada em farmácia... ciências moleculares... não tem muito que... e faz doutorado em inorgânica... não tem muito o que dizer o que o químico faz... é difícil por que hoje é amplo né?

(...)

QI2: (...)eu acho que tá tudo mais ou menos interligado né? a química... a física né? até hoje em dia tem gente da física fazendo pós em química... gente da química fazendo pós em física... não tem muito que... vai da questão de interesse... dependendo da pesquisa... o quanto que a pessoa vai se aprofundar...

(...)

QI2: analisando isso aqui ((os trechos))... eu acho que antigamente... a ciência era uma coisa só... eu acho né? e depois teve essa divisão... agora eles viram que não... realmente as coisas estão um pouco interligadas né? porque hoje em dia... o próprio químico que faz síntese... a parte de RMN e infravermelho... são métodos físicos... chamam métodos físicos aplicados na química né? mas geralmente um entendimento aprofundado da técnica é mais

é pra um físico né? aí o físico tem entendimento das equações... mais matemático... a questão da matemática aplicada... eu acho que tá tudo mais ou menos interligado né? a química... a física né? (...)

Q12: isso/ na verdade a própria química... física e biologia é chamada de ciências da natureza... acho que ela sempre... se for ver... dependendo do ponto de vista né? acho que são linhas... alguém pode achar tem uma divisão... mas na própria química não tem divisão... antigamente... química inorgânica os demais elementos... orgânica estudava os compostos... mas hoje eu vejo que é tudo a mesma coisa... é difícil dizer assim pra um aluno/ química orgânica é pra compostos de carbono... compostos orgânicos... embora eu trabalho... a maior parte dos compostos de coordenação tem molécula orgânica...

QO1: vou explicar... nosso laboratório mexe com biomateriais poliméricos... então eu pensei em um símbolo de um ser humano... tipo o homem virtruviano... com alguma coisa assim do símbolo da química... algo nesse sentido... que misture a química com a parte da área médica... que é nosso trabalho a gente faz polímeros pra área médica

QO2: químico trabalha com substâncias... independente da área... é sempre interação da matéria com alguma coisa né? física... é obvil que tem a parte de materiais... mas tem seu lado teórico... não que não tenha na química... mas a física visa outras coisas... como em outras áreas... então químico é isso... lida com substâncias ... obviamente hoje têm as áreas ditas de interface né? você não fica mais só naquele seu conhecimento né? mas o que eu fosse definir o que o químico faz eu acho que ele trabalha com substâncias...

(...)

QO2: muito importante... pra química orgânica principalmente... e eu acho também essa questão de química e física... apesar de eu não gostar muito de física ((se referindo ao trecho de Heitler))... mas isso é uma verdade... que a química e a física sempre andam lado a lado... mais do que com outras áreas do conhecimento... mas se for ver qual que eu me identifico mais é com o químico Whöler e o sucesso de preparar substâncias orgânicas... foi um químico diferencial pra época ele conseguiu enxergar coisas pro futuro que acabaram acontecendo mesmo ... e naquela época... mil oitocentos e vinte oito... realmente era uma pessoa diferenciada...

2. CARACTERÍSTICAS DA TEORIA DA QUÍMICA

2.1. REALISMO QUÍMICO COM REFERÊNCIA A IMAGENS

QA1: é... na verdade... o que eu penso... sem analisar nada especificamente... esse aqui ((tabela)) caracteriza cada pico né? e juntando essas informações você chega na molécula

Lemes: isso é uma evidência experimental? o que o infravermelho te dá?

QA1: na verdade é um quebra-cabeça né? cada pico você obtém um estiramento... e você consegue por meio desse estiramento... várias peças do quebra-cabeça e vai juntando uma a outra até chegar na figura desejada....

(...)

QA1: o que ele ((o 1º fragmento do artigo sobre orbitais)) tá mostrando? pra mim... uma descoberta científica... os orbitais d já existem e ele tá mostrando isso... trazendo ao mundo... provando que isso existe... os buracos d do átomo de cobre... e também mostrando a existência da ligação desse composto... muito legal isso...

Lemes: e esse outro?

QA1: mesma coisa... a partir daquilo que já existe... consegue mostrar... provar...

(...)

Lemes: então pra gente considerar que tem estiramento... a gente tem que considerar que existem ligações químicas...

QA1: e que existem orbitais e que existem elétrons...

QA2: através da teoria de orbitais moleculares você pode estar explicando certa rigidez que uma ligação tem... se ela é sujeita a rotações... estiramentos ou ela é uma coisa mais rígida... se pegar um carbono é bem mais simples né? pode ter ligações simples... onde a todo momento você pode ter rotação nos dois carbonos... por exemplo o etano... quando você tem o eteno ou o etino... você já tem uma certa... impedimento pra ocorrer essas vibrações... então na verdade você está falando de orbitais pi... pi e sigma... então... dá pra explicar os dois... (...)

QA2: os dois tratam de... da parte de ligações químicas... mais específico... na parte de... teoria do... no caso aqui... de orbitais moleculares... é de uma certa forma... os dois na parte de estruturas cristalinas né? Então... de maneira geral... fala sobre... a estrutura eletrônica dos materiais

(...)

Lemes: então na questão do ...mapa da densidade eletrônica do material ... seria um passo a mais que a gente estaria dando... né?

QA2: é... algo novo né? acho que infravermelho já foi bastante estudado já né? você utiliza pra caracterizar um material que você acabou de sintetizar... você tá mostrando algo diferente né? que define mais a matéria mesmo... algo bem em escala menor... como que é? mapa de densidades eletrônicas... também é a característica de um material... mas de outra...

Lemes: eles estão falando de moléculas...

QA2: o ((nível)) molecular né? se eu tenho um composto orgânico eu tenho outro tipos de ligações... aqui eu vou ter a teoria de ligação metal-metal... que tem um mar de elétrons né? então para você caracterizar você vai ver como que está espalhado esses elétrons no material

QBQ1: primeiramente a gente vai ter picos aqui... no infravermelho... então são esses números e a frequência... e o pico máximo foi medido no eixo x né? e ao longo dessa frequência você está vendo os picos de transmitância e cada um desses grupos na molécula... eles vão ter uma transmitância... na região do infravermelho... diferente... por que os elétrons entre esses átomos vão estar dispostos de uma forma diferente... se você tiver uma carbonila... se você tiver um C-H... eles vão estar transmitindo em um comprimento de onda diferente... então se você conhece quais são os picos que emite essa transmitância e uma tabela... você vai poder saber que cada pico desse correspondente a um ambiente químico dentro dessa molécula... então você vai saber que um pico tá relacionado a uma carbonila em um mesmo carbono... se a carbonila tá ligada a um hidrogênio

QBQ1: (...) você tá vendo uma molécula de óxido de cobre... nada mais é... do que tirando uma série de fotos em instantes... e vendo qual a densidade de elétrons ao redor dessa molécula e conseguir diferenciar quais elétrons são provenientes de orbitais atômicos e quais são de orbitais moleculares... ou seja... são elétrons compartilhados daquela molécula...(...)

QBQ1: (...) acontece que aquele experimento ((o experimento que utiliza raios-x)) tá te dando um feedback de que faz sentido ter uma densidade eletrônica ali/ ponto/ isso não quer dizer que com certeza existe uma densidade eletrônica naquele lugar... mas alguma coisa está se aglomerando naquele ponto e que dificulta a passagem da radiação ali... e pelas características de como essa onda está sendo perturbada... nós podemos dizer que é o que a gente chama de elétron ou não...(...)

Lemes: então o que a gente queria relacionar... o que você confirmou mais ou menos o que a gente entendeu aqui ((parágrafo))... é que você sabe que os orbitais são expressões matemáticas que descreve a densidade eletrônica... mas você pressupõe... lembrando que a gente tá tentando entender como que o químico pensa... então você pressupõe que existem átomos e existem as ligações

QBQ1: depende o que você considera existir...

Lemes: e como você considera?

QBQ1: tipo... felicidade existe? tipo... alegria existe? você só vê a demonstração da alegria... demonstração da felicidade... então a gente cria um ente que a gente chama de felicidade... os átomos é a mesma coisa... a gente tem indícios e pra explicar uma lacuna do que a gente entende... pra ligar uma coisa na outra... a gente chamou uma coisinha de átomo

Lemes: mas então... quando a gente chamou isso de átomo... porque quando vocês colocam a amostra no infravermelho... a gente tem um modelo de interação do infravermelho com aquela matéria...

QBQ1: hunrum... ((concordando))

Lemes: ... do modelo de ligação... do modelo de átomo... então é o modelo... do modelo... do modelo

QBQ1: sim... a partir do momento que você tem uma... se a sua interpretação daquilo corrobora com o modelo pré-existente... você assume que os dois têm conexão e um suporta o outro

QBQ1: não... não preciso desse grau de resolução pra eu poder olhar uma proteína/ o máximo que eu vou... olhando pra proteína... o que eu preciso ir é densidade eletrônica... pronto/ não de orbital/ é tipo... potencial eletrostático da superfície da proteína... então... eu vejo a proteína como se fosse uma superfície irregular... então ela têm concavidades... têm sulcos... por quê? por que... porque ela tem efeito estérico entre os átomos...(...)

QBQ2: (...) a capacidade de abstração... porque no fundo a gente está falando o tempo inteiro de coisas que a gente não vê/ então a gente tem que ter fé... tem que acreditar que o átomo é daquela maneira... é um tanto de fé e um tanto de abstração... se você conseguir pensar aquilo direitinho e pensar que isso realmente pode acontecer ou... a minha visualização três-d é horrível... então pega aqueles complexos que são assim e assado... e você fica com as canetas fazendo assim e assim... então eu acho que a capacidade de abstração é muito importante...

QBQ2: ela ((a técnica de infravermelho)) me dá de informação das vibrações das ligações de cada átomo... aliás... entre cada átomo... a vibração e de certa forma o movimento que elas fazem... aí dá pra discernir o estiramento da deformação... (...)

QBQ2: provavelmente eles mapearam... conseguiram mapear a distribuição eletrônica do óxido de cobre...(...) a gente tá começando conseguir ver a distribuição eletrônica que faz a gente acreditar que os átomos são daquele jeito mesmo... (...)

Lemes: com essa fala... não foi só você... foi a maioria... parecia que o químico supõe/ considerando que seja real os átomos e as ligações então aí eu explico um modelo vibracional das ligações e aí eu explico o infravermelho... o que você acha... que na hora que você lida com isso... quando você está lá olhando tanto RMN... etc... o que que você pensa?

QBQ2: eu acho que... se você ficar pensando o tempo inteiro que é um modelo disso... é um modelo daquilo não sei o que... você fica louco e você não trabalha/ você precisa mesmo assumir que alguma coisa é real... tanto que eu falo... se... até o fim da minha vida... alguém chegar a conclusão que o átomo não é daquele jeito... meu mundo vai cair/ prefiro morrer antes/ por que você tem que acreditar que alguma coisa é real/ exatamente isso que você falou/ partindo do pressuposto que os átomos são assim... que eles se ligam assim... que a ligação vibra e que é assim que funciona... vamos embora decifrar esse negócio/ tem que partir de alguma coisa... pra mim tem que ser real nesse ponto

Lemes: por que quando você fala “elas estão determinadas” como assim? átomos existem... ligação existe? como a estrutura tá determinada?

QBQ2: se você pensa no modelo... do modelo... do modelo... você vai pra casa e senta e chora/

(...)

QBQ2: distribuição eletrônica eu não to falando um-s-dois... dois-s-dois... não... o que eu quero dizer é... um mapeamento...

Lemes: seria distribuição de distribuir... uma coisa em volta?

QBQ2: ISSO/ é olhar e como se fosse fazer uma topologia... enfim... da coisa.... aqui tem mais elétrons... aqui tem menos elétrons... dá pra fazer uma curva de nível até...

QF1: (...) daí ele ((o orientador)) apresenta uma função e fala - tá aqui o orbital s do hidrogênio... ele não é mais do que isso AQUI - entendeu? mas assim... eu acho que a gente tenta sempre buscar uma representação mais simples pra gente entender como essas daqui... então a gente sai de um modelo mais completo... mais complicado e tenta passar pra uma interpretação mais gráfica né? mais física... mais plausível pra gente compreender e tentar explicar os fenômenos...

QF2: infravermelho é uma técnica que mede... basicamente... a frequência de vibração das ligações químicas... dá informação sobre força de ligação... e estrutura da molécula... não é a melhor técnica para determinação estrutural... mas dá uma boa ideia/ a tabela tem correspondência... é uma tabulação do gráfico... pegando as principais frequências... as principais bandas

Lemes: o que que tudo isso representa? o que esse espectro significa?

QI1: ele ((o infravermelho)) representa os tipos de ligações e como elas estão se comportando quando elas são estimuladas pelo infravermelho... no caso... e com isso dá pra saber de que forma elas estão ligadas

QI2: bom... eu desconheço o tipo de técnica... mas foi utilizado... eles utilizaram um método físico... difração de raio-x... e na verdade fizeram... existe um programa computacional que tenta relacionar o método físico... eu acho que... é uma interface entre o raio-x e química computacional... pegam essas substâncias e tentam calcular... tem um programa computacional que faz essas formas de orbitais... e essas formas de orbitais também... a gente tá acostumado com essas formas que aparecem... mas é para o átomo de hidrogênio... para outros... que têm mais elétrons... não tem aquela forma que a gente tá acostumado... e quem faz isso aí é o químico teórico... que faz esse tipo de análise... sai fora do meu... eu não mexo com química computacional... e raio-x também... eu não faço raio-x né?

Lemes: e essa de microscopia eletrônica de emissão de campo?

QI2: eu desconheço esse tipo de técnica né? porque até então... essas formas dos orbitais eram muito teórico... não sei se agora tem um equipamento que pode realmente enxergar aquela forma... têm algumas técnicas de espectroscopia AFM de força atômica... que a agulha chega ser tão fina... da dimensão de alguns átomos assim... então você consegue mexer... você consegue escrever um nome... mover átomos/ escrever uma letra com átomos com essa microscopia de força atômica aí...mas eu não conheço bem a técnica...

Lemes: e aí você disse que “eles utilizaram um método físico... difração de raio-x e na verdade fizeram... existe um programa computacional que tenta relacionar o método físico... eu acho que é uma interface entre o raio-x e química computacional” esse raio-x... você está entendendo como um experimento?

QI2: é a técnica né? eu acredito que é a TÉCNICA de raio-x... cristalografia né?

Lemes: hm...

QI2: que usa raio-x pra interpretar a estrutura tridimensional de moléculas...

(...)

Lemes: (...) se existe uma vibração da molécula ou estiramento da ligação e tudo mais... então nós estamos falando de ligações reais... então existe a molécula e existe ligação

QI2: isso

Lemes: tá/ mas os orbitais não?...

QI2: é que vai... é que a simetria da molécula tem a ver com a energia dos orbitais... se tem uma molécula polar ou apolar... isso que a distribuição de carga nesses orbitais... é que vai influenciar na simetria dela também... com isso vai dar pra tentar relacionar isso com o espectro eletrônico vibracional

Lemes: tá... mas aí você falou que é só para o átomo de hidrogênio...

Q12: ah/ tá/ aqui... esses modelos que aparecem nos livros textos... são para átomos hidrogenóides... pra átomos mais complexos têm outras formas

Lemes: e esses dois aqui? ((mostrando os excertos de orbitais)) esse aqui é pra carbono... e esse aqui é do óxido de cobre...

Q12: é que tem uns que eles pegam... acho que são orbitais diferentes...pode ser o s... pode ser o p... pode ser não sei o que... tenho px... py... pz tá? é que assim... isso aqui não dá pra enxergar... não dá pra enxergar isso aqui no microscópio né? Isso aí é feito através de cálculos da mecânica quântica... coordenadas polares... dá pra chegar nessa forma

Lemes: entendi... então existe... mas não dá pra enxergar?

Q12: existe ((orbital)) e por isso que a molécula... por causa dessa forma... por isso que a molécula tem ... um metano é tetraedro... se não... se fosse circular poderia ser de qualquer jeito ali né? uma forma pentagonal... pirâmide de base quadrada... aquelas formas de geometria molecular...(...)

QO1: geralmente a carbonila... a faixa de vibração no espectro é de mil seiscentos e oitenta e vai até mil e oitocentos... ela varia conforme o tipo de carbonila né? a carbonila de aldeído... ela tem uma frequência um pouco menor... entendeu? agora... geralmente... quando tem carbonila de éster ou então carbonila de cetona que tem metilas... grupos doadores de elétrons... doando elétrons com a carbonila... as frequências ficam um pouco maiores... então é essa relação que eu associo... nessa faixa de carbonila de carbonila de mil setecentos e dois eu realmente eu diria que é uma carbonila de um aldeído né? Aí tem as vibrações fora do plano que seria... referentes a ligação C-H... C-H de aromático né? C-H de alifático né? mas C-H de aromático... geralmente cai aqui... o principal aqui na molécula... o bem importante seria o pico da carbonila né? porque do pico da carbonila a gente pode ter bastante informação... se é aldeído... se é cetona... depende da região que ela cai... e esses picos do espectros que diz se é aromático ou não...

QO1: bom eles utilizaram a ferramenta de raio-x ...experimento que dá dados da distribuição pra densidade eletrônica e... fizeram uma comparação dos resultados com os cálculos que eles já tinham feitos... encontrados na literatura... mais dados que eles descobriram... pra ver o espaço de um orbital ao outro... pra deduzir que o cobre tinha uma ligação... formava dois cobres ligados... dois cobres estavam ligados... na verdade eles fizeram isso pra ver como que era a ligação... ligação do composto aqui (...) pra mim isso ((orbitais)) era bastante teórico... quando a gente estuda a parte de orbitais é muito teórico e com cálculo.... com a tecnologia você pode provar a existência do orbital

Trecho do parágrafo escrito:

(...) Alguns experimentos utilizando moléculas com grupo carbonila mostram a existência da dificuldade reacional quando a carbonila é ligada a um grupo doador de elétrons, como exemplo uma metila que também dificulta o andamento reacional por ser um grupo volumoso.(...)

QO2: esse aqui é um espectro de infravermelho... um tipo de espectroscopia que nada mais é que a interação da energia com a matéria... tem vários tipos de interações... dependendo do comprimento de onda dessa energia... é um tipo de gráfico... é um tipo de interação e esse é específico do infravermelho... então basicamente é o que esse comprimento de onda... o que essa energia do infravermelho consegue fazer na molécula... o que ele consegue é as mudanças em estiramento... aumenta a distância da ligação... diminui... girar a molécula... e essas coisas é colocada na forma de um gráfico... (...)

QO2: (...)eles fizeram vários experimentos... como difração quantitativa de elétrons em feixe convergente... raio-x... mapearam a distribuição e densidade eletrônica... tudo no sentido de observar a estrutura do óxido de cobre... e esse aqui ((lendo o trecho do artigo do Physical Review))... então... o que eu pude entender nesse trabalho é que eles desenvolveram então... uma técnica... microscopia eletrônica nada mais é do que uma técnica pra observar estruturas... superfície de moléculas e eles desenvolveram uma nova técnica pra visualizar melhor essa superfície... definiria isso...

Lemes: pra você falar de distância de ligação... de estiramento... de interação na molécula... a gente tem que falar que a molécula existe... pra pensar nisso...

QO2: exato... como eu falei... você tem que ter certos conhecimentos pra tu ir formando... conhecimentos que vão envolver... tem que ver bem o que que é uma molécula... o que que é uma ligação... necessariamente você não precisa ter conhecimento de orbitais já bem claro... mas uma ligação química... o que que é... a distância entre dois átomos... que aumenta... diminui e gira... tem que ter um conhecimento de moléculas... de distância de ligação...esses detalhes mais básicos... faixa espectral do infravermelho... outras faixas de radiação... é necessário...

2.2. REALISMO QUÍMICO SEM REFERÊNCIA A IMAGENS

QA1 –

QA2: bom/ eu faço atribuição... então aqui já tem as tabelas... e tem na literatura livros sobre isso... você tem a onde você tem um sinal decorrente a um determinado grupo... Por exemplo aqui um grupo C dupla O... ele acontece aproximadamente em mil setecentos e dois centímetros a menos um.... então você pode chegar aqui ((espectro)) e vê setecentos e dois vai estar mais ou menos aqui... então você tem uma transmitância... então esse sinal aqui é característico desse agrupamento

Lemes: a última confirmação é que assim... pra você falar assim... eu faço uma atribuição pra determinado grupo... esse grupo vai ter uma transmitância que vai gerar um pico... você tá pressupondo que existe esse grupo... que não é um modelo... que ele é real

QA2: É/ porque existe ((o grupo))... na verdade foi catalogado... no caso certo grupo foi estudado... foi provado que existe aquilo lá... e vai pra base de dados

QBQ1 –

QBQ2 –

QF1: ((os orbitais)) são simplesmente funções matemáticas e que tipo... e não tem significado físico assim... é complicado... pra quem é um estudante da nossa área... pra quem não é...

QF1: não quis dizer que eu não acredito no modelo molecular ((explicando seu posicionamento no trecho da transcrição da sua 1ª entrevista))... sim/ eu acredito/ até pela minha formação de químico... eu aprendi a teoria que explica os modelos moleculares né? de estrutura... porque assim... a gente aprende de uma forma bem mais simples a descrever... por exemplo... a geometria das moléculas né? que é a teoria de repulsão do par eletrônico... aquelas coisas que a gente aprende em química geral/ e a gente tem isso como conceito... assim... só que... exatamente o que eu escrevi aqui... pra mim... no meu ponto de vista... estrutura molecular é um conceito muito mais amplo... ou seja... é o arranjo de átomos que tal molécula adquire que ela que fique mais... digamos assim... confortável/ que quer dizer que tem a menor energia.... que seja mais estável/ pra mim esse é o conceito de estrutura molecular/ claro/ esse é um conceito mais... correto...e aquelas teorias que a gente aprende nos primeiros anos são mais simples... mas eu conheço muitos casos que fogem a regra... aquele tipo de regra... por isso que eu tenho esse conceito mais... estrutura molecular é isso/ arranjo de átomos que a molécula adquire para minimizar essa energia né? chegar no fundo do poço

QF1: (...) tem muita gente que fala ... AH/ orbital não existe... existe/ claro que existe ((o orbital))... só que é um conceito muito complexo... é difícil... até pra gente que tá aqui na pós-graduação... acho que é muito complexo...

QF2: mas orbital é uma representação gráfica de uma distribuição eletrônica... só que a gente vê essa distribuição pra um átomo só né? que vale pro átomo de hidrogênio e depois a gente expande pra outros átomos... mas basicamente átomos com um elétron e um próton... quando você diz que você tem uma imagem de um orbital... você tá fazendo uma imagem de algo que não existe... orbital não existe/ existe é uma representação gráfica de uma equação...

Lemes: mas se você for pensar... por exemplo... na orgânica... quando eles vão falar de impedimento estérico... eles falam que os orbitais lá... não sei o que...do carbono nananam...

QF2: o termo orbital aí é distribuição de energia... distribuição de probabilidade de um elétron ou pares de elétrons naquela região... dando um impedimento ali por conta da interação entre os elétrons... mas orbital é distribuição de probabilidade... não é algo que tenha existência física... tem distribuição de energia... então você pode dizer / tem mais energia que o outro/ tem mais energia nesse ponto... e a interação da energia desse conjunto de elétrons e interação de energia desse outro conjunto... (...)

QF2: (...) uma coisa é você ver uma vibração de uma ligação química... outra coisa é você ver o orbital

Lemes: tá mais uma ligação química...

QF2: é uma interação entre diversos orbitais...

Lemes: mas o que que... AH/ esse estiramento aqui é do C dupla O... mas alguém já viu o C dupla O?

QF2: ninguém viu o C dupla O/ no meu ponto de vista... tá você tem dois orbitais... pode chamar de orbital molecular... pode chamar do que quiser... vamos falar de orbital molecular porque dá uma distancia de ligação... que você tá medindo... no fim das contas... é a variação da distância de ligação entre dois átomos ou dois grupos... em um determinado espaço de tempo... você tá medindo... você não tá fazendo uma imagem disso... você está medindo a variação de distância de ligação... só isso... (...)

Lemes: mas se a gente mede a variação da distância de ligação... por que a gente não pode medir o orbital? medir a distribuição eletrônica?

QF2: ah sim/ a gente pode medir a distribuição eletrônica... mas a distribuição eletrônica são vários orbitais... a ideia de vários orbitais...a gente usa o orbital só pra encaixar os elétrons... sabendo que os elétrons ocorrem emparelhados... com os spin opostos... direção de giro... (...)

Lemes: (...) aí você termina falando assim ((leio o trecho)) “uma coisa é uma vibração de uma ligação química... outra coisa é ver o orbital”... então eu pergunto “esse estiramento é do C dupla O... mas alguém viu a C dupla O?” aí você fala “ninguém viu... não to vendo a ligação C dupla O... eu to vendo a variação da distância de ligação”... a dúvida que ficou é assim/ se pra trabalhar com química... porque tá... eu não to vendo ali uma ligação C dupla O... eu to vendo a variação da distância... então existe ligação química?

QF2: só não tô vendo essa ligação/ mas essa ligação existe...

(...)

QF2: o orbital... como eu disse... é uma interpretação de uma equação... (...)

QI1: É/ ele tá observando uma imagem que ele obteve através de uma técnica ... ninguém tá enxergando o átomo...

Trecho do parágrafo escrito:

(...) Os livros apresentam imagens que são somente representações da ligação, ou um gráfico matemático no caso da representação dos orbitais, e isso pode ajudar a entender o conceito abstrato, mas o professor (ou o livro) sempre deve chamar a atenção que aquilo é uma simples representação.(...)

Lemes: mas... lembrando que a minha pesquisa é sobre... entender como esses dez pós-graduandos pensam sobre isso... como que eles lidam... pra tentar entender... pelos menos um pouco... de como o químico trabalha e lida com as teorias... na... no começo... no infravermelho... quando você fala em tipos de ligações... você tá tentando caracterizar a molécula... então você tá considerando que molécula e ligação existe... não?

QI1: sim... as moléculas são ligadas... elas interagem... a gente chama de interação de ligação

Lemes: tá... mas aí a gente não consegue ver o átomo? se ela existe... porque a gente não consegue ver o átomo?

QI1: por que a gente não chegou... tem uma limitação ótica... na física... que a gente não consegue enxergar tão pequeno assim... pra visualizar... mas acontece interações eletrônicas entre os elétrons...a mesma coisa... a gente não consegue enxergar uma corrente elétrica passando no fio... num microscópico...mas sabe que ela existe.... hoje tem corrente elétrica... tem equações matemáticas e químicas... mas não dá pra ver o elétrons correndo no fio

QI2 –

QO1 –

QO2 –

2.3. VALORIZAÇÃO DAS EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

QA1: AH/ estudar as moléculas em si né ? acho que de todas as sub-áreas da química... o que elas têm em comum é estudar o comportamento químico das moléculas... eu acho que mais específico que isso não tem...

(...)

QA1: o que vem sempre na mente alguma formulação né? uma pessoa fazendo uma formulação... mexendo com tubo de ensaio... eu acho que isso caracteriza... todas as áreas de modo geral... e se eu... por exemplo... desenhar um equipamento... seria mais pro caso da química analítica seria daqui né? mostrar um eletrograma com picos... aí vai caracterizar só aqui.... mas um logo que caracterizaria todas as sub-áreas da química seria mais a parte de mexer com tubo de ensaio ou com balão volumétrico... é uma coisa que todas as áreas usam... inclusive vocês né? porque algum teste vocês fazem na vida né... não é possível...

QA2: AH/ sempre gostei de mexer com umas coisas diferentes né? misturar algo pra ver no que dava... então em função disso mesmo...

(...)

QA2: o meu ((trabalho)) seria baseado nesse equipamento igual atrás de você aí... (...)

QA2: acho que... tem a conexão entre a teórica e a experimental né? só que... nem tudo que é proposto teoricamente... funciona experimentalmente... é isso que eu acho que diferencia ((a química da física))...

Lemes: então você acha que a química... o diferencial dela é a parte experimental?

QA2: a parte empírica da coisa... você faz e depois você tenta achar um modelo pra que aquilo lá corresponda ou seja... aproxime com o que você obteve nos dados experimentais né? mas muita gente defende que através de um cálculo você pode chegar... calculou então é possível... você vai e faz aquela reação que conduz a determinado composto... mas dependendo das condições... vai demorar dez mil anos pra funcionar... então eu acho que mais isso influencia mesmo...

(...)

QA2: É/ porque existe ((o grupo))... na verdade foi catalogado... no caso certo grupo foi estudado... foi provado que existe aquilo lá... e vai pra base de dados

QBQ1: (...)uma coisa que eu acho importante em todas as químicas... inclusive na que eu trabalho.. é você ter essa abstração de quantidade... por exemplo... quando você imagina... por exemplo... concentração molar de alguma coisa... mesmo trabalhando com proteínas dentro de uma célula... eu consigo imaginar que a concentração de proteínas tem uma importância... um biólogo... não... um biólogo....(...)

QBQ1: (...)conseguir ser mais ágil na hora de você improvisar... por exemplo... você tá usando um tipo de solvente em um experimento... só que esse solvente não está funcionando tão bem quanto você imaginou... você tá mimetizando um experimento que já está descrito na literatura... só que um pouco

diferente... e então você faz... repete esse experimento dá literatura... para o seu sistema... e não funciona tão bem... na hora que você vai querer mudar... esse experimento... você tem que ter uma noção de conceitos químicos muito bom... por que vamos mudar uma acetanitrila por um metanol... eu posso fazer isso ou não posso? porque? se eu mudar eu vou ter que aditivar essa mediação com o quê... pra poder aumentar a polaridade ou não?(...)

QBQ1: (...)então... às vezes ele ((o físico)) gera modelos... que eles não sabem se faz sentido no contexto que eles estão fazendo... é como você montar um modelo de como que a lua existiu a partir de água... mas lá não tem água na lua... entende? mas os físicos não sabem que não tem água na lua... é só uma metáfora... mas enfim... então eles falam/ AH/ essa espécie pode estar usando isso pra isso... porque essa equação tá prevendo... mas a espécie nunca teve contato com estas coisas... então é isso que o químico e o biólogo têm mais... eles têm mais o *feeling* da área... sabem... por experiência... por ser ciências mais experimentais... o que pode ou não acontecer/ e o físico não/ ele tem... na mente eles podem imaginar um milhão de caminhos diferentes pra chegar na mesma coisa/ só que... vai escolher um desses um milhão de caminhos... o químico não/ o químico prefere que o experimento mostre pra ele qual o caminho que aconteceu/(...)

QBQ2: na verdade aí entra a bioquímica e a biomol.... biologia molecular... bioquímica... eu trabalho com microlitros e etc... normal... mas tudo de biomol é dois microlitros... um microlitro... eu começava a não ficar satisfeita com a precisão das coisas... eu não sei... era tudo micro demais para eu ver... como eu acabei na área de produtos naturais... então sempre... não sei explicar... tá colorido... eu vejo que a extração tá funcionando... eu vejo o decorrer do processo me deixa mais satisfeita... na verdade/ então eu acho que foi isso que eu fui pra bioquímica...

QBQ2: provavelmente eles mapearam... conseguiram mapear a distribuição eletrônica do óxido de cobre... compararam com o teórico... enfim... usando duas técnicas...(...) a gente tá começando conseguir ver a distribuição eletrônica que faz a gente acreditar que os átomos são daquele jeito mesmo... e que bom... (...)

QBQ2: teria que ser uma alga... com certeza... uma macroalga né? que são as algas visíveis... porque uma micro nem tem graça direito... embora eu trabalhe com elas... vistoso não é né? então tem que ser uma macroalga... eu não sei... dentro de uma gota para simbolizar extração... eu não sei direito... puxa/ eu nunca pensei nisso/

QF1: não sei... acho que preparar solução... acho que é o mínimo que o químico deve saber fazer...

Lemes: mas você... na sua área de simulação... você faz soluções?

QF1: não... a gente ((químicos teóricos)) não faz nada... não pega e não entra... eu não ponho a mão na massa desde dois mil e cinco...

(...)

Lemes: e qual a diferença entre a evidência experimental dada por essa instrumentação e se eu falar que esse benzaldeído é líquido... volátil... incolor... qual a diferença entre essas duas evidências?... tem alguma diferença?

QF1: não sei... aqui ((dados do infravermelho)) eu consigo visualizar melhor... acho... a molécula... se você me falar... tá aqui um benzaldeído... não sei... talvez pra quem trabalha mais ou tem mais afinidade com esse tipo de composto... se você falar ele já imagina a molécula/ agora... pra quem tá querendo descobrir ou querendo entender a estrutura molecular... com isso aqui ((dados do infravermelho)) ele já começa tem uma noção melhor... não sei...

Lemes: eu não tô medindo o quanto você sabe de química... fica tranquilo...

QF1: até porque... química... faz bastante tempo que eu não mexo...

QF2: o químico trabalha o estudo das transformações da matéria né? como produzir novos produtos e como entender como esses produtos interagem com o meio e com outros produtos químicos

QF2: (...) química é uma ciência experimental por excelência... então nós queremos resultados experimentais... a teoria é ótima... adoramos teoria... gosto muito de teoria... mas precisamos de resultados experimentais... sem eles não dá... (...)

QI1: não... acho que não... acho que ambas ((recortes que usam o termo descoberta)) devem ter desenvolvido suas teorias e testaram em laboratório e observaram os efeitos...

QI2: (...) mas aqui na área de síntese não... até o pessoal que faz ciências moleculares aqui... a parte de laboratório de química mesmo... não viu no curso... não fez iniciação ((iniciação científica))... é complicado porque não sabe fazer nada no laboratório... o básico... assim uma filtração... você tem que estar explicando pra ele... então às vezes não vai... o próprio... a maneira como... essa primeira questão aqui da aquosidade... o próprio entendimento assim... a própria visão... do químico sobre aquele fenômeno é diferente do físico... EU acho que isso aí também tem a ver com o tipo de abordagem... como é que ele foi educado... assim na faculdade... na maneira como ele enxerga a ciência né? é a mesma coisa na educação né? assim... a pessoa tenta reproduzir aquilo que... ele tenta imaginar um professor que ele teve né? que ele considerava legal assim... mas nem sempre... aquele professor que ele achou que era bom (...)

QI2: (...) seria uma... um procedimento pra mim no laboratório... se eu pegasse um artigo e fosse repetir aquilo que os outros... simplesmente fosse... acho que experimento tem muito mais a questão investigativa assim... se pegar um artigo né? e simplesmente fazer o que está ali escrito e da certo... sintetizar tal molécula... aí pego o artigo... faço igual e dão os mesmos resultados... agora se eu nunca... se eu quero propor algo

diferente... mexer em condições... pra ver se vai dar rendimento... acho que isso pra mim que seria um experimento... eu to experimentando... não é simplesmente... eu acho que doutorado... pesquisa... tem experimento... por que também não tem sentido eu fazer algo que já tem né?

 QO1: *nem tudo((da química é redutível a física))/ uma parte é/ eu acho que a quântica... é uma parte da química... um braço da parte da física... mas que fica na química... a física estuda mais a parte matemática... e o químico não trabalha tanto nessa parte de quântica... cálculos de Schrödinger... mas não é como os físicos estudam... então eu acho que essa parte... sim/*

Lemes: *e você acha que se mudar alguma coisa da quântica... não vai afetar nada na química?*

QO1: *depende... se for provado experimentalmente... a parte experimental é a prova....*

Trecho do parágrafo escrito:

Alguns experimentos utilizando moléculas com grupo carbonila mostram a existência da dificuldade reacional quando a carbonila é ligada a um grupo doador de elétrons, como exemplo uma metila que também dificulta o andamento reacional por ser um grupo volumoso.

 Lemes: *o que te atrai na inorgânica e na orgânica que não tem nos outros lugares da química?*

QO2: *eu acho que... na orgânica principalmente... é a parte do laboratório né? isso por outro lado até incomoda... porque as vezes a gente tá cansado de laboratório... mas é uma parte legal... eu acho.... você aprende muito no laboratório...*

Lemes: *a parte da síntese?*

QO2: *É/ realmente você vivência a química né? sabe o que que é química... sabe que não é simplesmente... no papel é muito bonito... mas na hora da realidade é bem diferente... (...)*

QO2: *químico trabalha com substâncias... independente da área... é sempre interação da matéria com alguma coisa né?*

2.4. CARÁTER QUALITATIVO E RELACIONAL ENTRE SUAS ENTIDADES

QA1: *AH/ estudar as moléculas em si né ? acho que de todas as sub-áreas da química... o que elas têm em comum é estudar o comportamento químico das moléculas... eu acho que mais específico que isso não tem...*

Lemes: **então quando vai pensar numa coisa mais prática...**

QA1: mais prática... no dia-a-dia não ((uso o orbital))... por isso... no entanto... eu tive dificuldade agora de escrever ((o parágrafo usando a palavra orbital))... porque é o que eu te falei... na prática a gente não... não acaba trazendo... AH/ porque tá acontecendo isso por causa do orbital lá lá lá lá lá lá... não/ praticamente falando aqui do infravermelho... é o estiramento das ligações químicas... mas não chega a pegar o básico... o bê-á-bá né? o que gerou a ligação química

QA2: ele ((o químico)) é mais no nível molecular... não que não trabalhe com nível menor... eu trabalho com eletroanalítica... então tem a presença de elétrons... mas é de uma molécula e não de um átomo

QA2: tem gente que usa ((orbitais)) pra pós... que pode explicar as transições eletrônicas... oxidação-redução... eu não chego nesses modelos... fico mais na energia pra tirar um elétron ou ganhar um elétron no sistema

Lemes: seria mais os pares de elétrons... e os elétrons...

QA2: é... se ele tem a possibilidade de oxidar espécie ou reduzir... tira ou doa um elétron... mas eu não costumo chegar a explicar por orbitais moleculares... por que dá pra explicar por HOMO... LUMO né? dá pra fazer isso também... mas eu não utilizo

QBQ1: (...) eu odiava biologia no colégio/ odiava/ porque? era muito descritiva pra mim/ a hemácia carrega oxigênio/ tá/ mas COMO a hemácia carrega o oxigênio? eu quero saber como...quais moléculas que são responsáveis pra isso? então acho que isso é importante pra todos os químicos... abstração de uma coisa que você não consegue ver... você conseguir mudar os parâmetros experimentais... ao seu bel prazer... racionalmente... racionalizar seu experimento... e sistematizar ele... pra você otimizar (...) biólogo tá interessado em outras coisas...

Lemes: em que coisas por exemplo?

QBQ1: vou dar um exemplo prático e fácil de entender... por exemplo/ o biólogo quando ele vai descrever a interação entre duas moléculas... ele usa uma bolinha ((para representar a molécula inteira))... porque o importante pra ele não é a carga daquela molécula... não é a polaridade dela... não é os átomos... o biólogo tá no nível molecular... o químico tá no nível mais atômico né? ele ((o químico)) se importa com as partes dentro da molécula... então pra ele ((biólogo)) interessa só que as moléculas interagem... nessas condições elas interagem... só que isso é limitado... porque isso funciona muito bem... mas chega uma hora você vai precisar saber o porquê que elas interagem o porquê elas não interagem... pra você mudar as condições... então os biólogos tão tendo que aprender química hoje em dia... e eu... na minha opinião... o químico aprender biologia é muito mais fácil que um biólogo aprender química... porque nossa formação... você sabe... tem um monte de coisa que a gente acha que não vai servir pra nada... aliás de prático que eu aprendi na graduação

eu não uso nada... nada/ mas acho que o pensamento químico me ajuda muito... porque eu olho um aparelho... eu lembro da analítica... daí eu vejo uma peça parecida quando desmontaram um cromatógrafo... pra mim eu sei o que é coluna... do que ela é feita... pra mim pelo menos pra mim ajuda muito... então pro biólogo... o foco dele é o fenômeno biológico e eu tive que aprender isso... é difícil pra mim também... não foi fácil... porque eu tive que enxergar a importância do fenômeno... distinguir o não é importante o que é importante nos fenômenos biológicos... e o que o biólogo está interessado... agora dentro de cada fenômeno tem uma série de descrições que estão carecendo de mecanismo molecular (...)

QBQ1: não... não preciso desse grau de resolução pra eu poder olhar uma proteína/ o máximo que eu vou... olhando pra proteína... o que eu preciso ir é densidade eletrônica... pronto/ não de orbital/ é tipo... potencial eletrostático da superfície da proteína... então... eu vejo a proteína como se fosse uma superfície irregular... então ela têm concavidades... têm sulcos... por quê? por que... porque ela tem efeito estérico entre os átomos... entre a matéria que é presente dentro dessas sub-unidades dessa macro molécula... ela tem então... massa... mas ao mesmo tempo que ela tem massa... que impede que outras coisas chegam perto... ela também tem carga... então ela tem uma superfície eletrostática... que também pode atrair ou repelir outras matérias... outras cargas... de chegarem perto dela... então é assim que a gente vê proteína... não vemos orbital molecular... não vemos orbital atômico... não vemos nada disso... não precisamos disso

QBQ2: não sei... talvez porque a física remeta a mim e remeta... na maioria das pessoas... a fórmulas... talvez porque física remeta a isso... e eu acho que a química pode ser compreendida sem você precisar de tantos números... não profundamente... não a magnitude de todas as forças... porque pra isso você precisa de números mesmo... mas eu acho que o fundamento da química... a parte mais básica... ela pode ser compreendida sem essa numerária... enfim...

Lemes: aí eu mostrei aqueles dois artigos que falam de microscopia e tal... e eu não coloquei distribuição eletrônica ((como palavra chave para a escrita do parágrafo))?

QBQ2: NÃO/YES/ ((super contente))

QBQ2: distribuição eletrônica eu não to falando um-s-dois... dois-s-dois... não... o que eu quero dizer é... um mapeamento...

Lemes: seria distribuição de distribuir... uma coisa em volta?

QBQ2: ISSO/ é olhar e como se fosse fazer uma topologia... enfim... da coisa.... aqui tem mais elétrons... aqui tem menos elétrons... dá pra fazer uma curva de nível até...

QF1: pra mim... isso aqui é... ((o espectro do infravermelho é)) nada mais nada menos... que a movimentação atômica né? o modelo que explica os modos vibracionais dessa molécula... é a única informação que () é uma informação estrutural... do que eu tenho no meu composto que eu to analisando...

Lemes: no caso da orgânica... os orbitais... eles são explicados baseados dos orbitais da física...

QF1: sim/ se você pegar quântica pura... têm uma série de equações que se você olhar você não consegue ver nenhuma representação pra aquilo... então por algum artifício matemático... a gente faz algumas alterações e a gente converte... consegue visualizar aquelas coisas... entendeu? não que não faça sentido... FAZ/ o que ta lá é a mais pura verdade... não é mentira... mas tudo é só representação... e os químicos eu acho que eles buscam muito isso... o que tem de diferente do químico do físico/ o físico prefere olhar pra equação... enquanto o químico prefere olhar para o orbital ... é bem engraçado isso... e o químico vai explicar suas coisas em cima daquilo... naquela representação que foi lhe dada... a química orgânica... por exemplo... é isso... a explicação dos mecanismos é basicamente isso...

(...)

QF1: É/ exatamente/ o químico ele associa muito ... todo processo que ele está lidando com... sei lá... que um elétron saiu de um orbital e foi pra aquele... ou uma transição do orbital HOMO pro LUMO... entendeu? e o físico não tem muito esse conceito... é o que eu vejo... não conheço muitos físicos assim né? mas pelo que eu estudei de química quântica... eu estudei o básico pro meu trabalho... acho que tem essa diferença do químico pro físico... do jeito de pensar... mas eu acho que é um modelo que o químico assumiu... e que explica de uma certa maneira o que ele precisa né? não que seja errado... não saberia dizer o que é o mais certo... acho que é uma questão de criação mesmo né? o químico pro físico... o físico aprendeu olhar daquele jeito... enquanto o químico daquele jeito... eles se entendem... só que são coisas bem diferentes pro mesmo conceito.

QF2: infravermelho é uma técnica que mede... basicamente... a frequência de vibração das ligações químicas... dá informação sobre força de ligação... e estrutura da molécula... não é a melhor técnica para determinação estrutural... mas dá uma boa ideia/ (...)

Lemes: o que que tudo isso representa? o que esse espectro significa?

QI1: ele ((o infravermelho)) representa os tipos de ligações e como elas estão se comportando quando elas são estimuladas pelo infravermelho... no caso... e com isso dá pra saber de que forma elas estão ligadas

QI2 –

QO1: eu acho assim... como a tabela periódica é uma coisa universal pros químicos... então qualquer coisa que você... essa descoberta... no caso... ela tem o impacto talvez maior... porque a tabela periódica é uma linguagem que todos os químicos utilizam então essa é uma descoberta científica... de grande impacto... (...)

QO1: trabalho com polímeros bioabsorvíveis... são produtos que a degradação dele é metabolizado pelo corpo... eles são oxidados e entram na via metabólica né? e eles são degradados em C-O dois e água

Lemes: e tem alguma propriedade de algum átomo que faz ele ((polímero)) ser desse jeito?

QO1: um átomo não... na verdade são os grupos funcionais... são ésteres que é uma função orgânica que ajuda ele ser absorvido

Lemes: a distribuição da densidade eletrônica... quando você pensa no infravermelho... você também está pensando em... nas ligações C-H e tudo mais... você pensa em orbital ou você pensa em ligações mais simples? quando você vai falar da vibração da carbonila... grupos doadores de elétrons... ligação C-H da molécula... você está pensando em termos de orbitais?

QO1: não... em uma coisa mais simples

Lemes: mas aqui ((no parágrafo escrito)) você está falando em sobreposição de orbitais... aí você utiliza os orbitais pra explicar...

QO1: hunrum ((concordando)) ... ((uso orbital)) pra complementar... na verdade... ligação... pra ir um pouco além...

Lemes: que tipo de substâncias você trabalha na sua pesquisa?

QO2: substâncias orgânicas... a química orgânica trabalha com compostos na qual a base é o carbono e hidrogênio... obviamente que tem outros elementos... e aqui... especificamente no nosso laboratório... a gente trabalha com os elementos selênio e telúrio... então na minha pesquisa esses dois átomos são aplicados em compostos orgânicos...

QO2: então... ele parte do conhecimento químico... que é próprio dos químicos né? conhecer a reatividade de um composto... conhecer o caráter desse composto... que tipo de reações esse composto pode fazer... é um composto estável ou ele é instável? isso são coisas que... são conhecimentos que são apropriados pra reação química...

(...)

Lemes: vamos pensar... o orgânico... quando está pensando em impedimento estérico... a gente fala... AH/ o orbital ta impedindo estéricamente que reaja em tal parte da molécula.../ então é como se estivesse mesmo... existente o orbital...

QO2: sim... os orbitais têm lá... mas a visualização dos orbitais é que... vamos dizer... é algo ... até que muita gente nem gosta muito de estudar... exatamente por que é algo que tem que imaginar um pouco... tem que forçar a mente pra tu conseguir enxergar e tentar tirar uma ideia de como funciona...

mas isso é tudo com base em estudos com equipamentos modernos... obviamente eles não fornecem as formas bonitas... são gráficos... muito matemático... mas depois a gente sempre tenta simplificar... ver o lado... assim... qualitativo da coisa... por exemplo isso né? tem um impedimento estérico... tem um volume muito grande... uma densidade eletrônica muito grande que impede... e aí a gente tenta botar isso em uma maneira... tanto... quem fez o experimento... pras pessoas possam entender né? então esse é o ponto chave/ tornar aquela informação numa maneira mais acessível a todos né?

QO2: é... mas assim... você não precisa ter um conhecimento afimco de orbitais... pra entender a técnica de infravermelho.... obviamente ajuda... e é bom... mas não precisa

2.5. UTILIZAÇÃO DE MÚLTIPLOS MODELOS

QA1: (...)...a parte de orbital molecular...trazer a parte de inorgânica pra explicar a síntese orgânica... e eu achava assim... terrível de difícil...(..)

QA1: (...) eu concordo que eu não preciso pegar um livro de química quântica pra fazer a minha pesquisa... entende? (...)

Lemes: ((depois de ler o recorte da transcrição pra ela)) e aí a gente ficou na dúvida se quando você pensa... o objetivo é saber como que os dez químicos pensam... na questão do estiramento... você pensa as ligações como orbitais?

QA1: sim... sim são os orbitais que se sobrepõem e formam a ligação química né?

QA1: se é os orbitais se movendo ((nas ligações no infravermelho))? na prática... sinceramente... eu não penso em orbitais... agora se você me perguntar... como é que forma as ligações químicas... o que vem na cabeça são os orbitais... a sobreposição né? aqui no caso a sobreposição dos orbitais p

Lemes: então quando vai pensar numa coisa mais prática...

QA1: mais prática... no dia-a-dia não ((uso o orbital))... por isso... no entanto... eu tive dificuldade agora de escrever ((o parágrafo usando a palavra orbital))... porque é o que eu te falei... na prática a gente não... não acaba trazendo... AH/ porque tá acontecendo isso por causa do orbital lá lá lá lá lá lá... não/ praticamente falando aqui do infravermelho... é o estiramento das ligações químicas... mas não chega a pegar o básico... o bê-á-bá né? o que gerou a ligação química

QA2: o ((nível)) molecular né? se eu tenho um composto orgânico eu tenho outro tipos de ligações... aqui eu vou ter a teoria de ligação metal-metal... que tem um mar de elétrons né? então para você caracterizar você vai ver como que está espalhado esses elétrons no material

QA2: através da teoria de orbitais moleculares você pode estar explicando certa rigidez que uma ligação tem... se ela é sujeita a rotações... estiramentos ou ela é uma coisa mais rígida... se pegar um carbono é bem mais simples né? pode ter ligações simples... onde a todo momento você pode ter rotação nos dois carbonos... por exemplo o etano... quando você tem o eteno ou o etino... você já tem uma certa... impedimento pra ocorrer essas vibrações... então na verdade você está falando de orbitais pi... pi e sigma... então... dá pra explicar os dois... aqui nesse caso o infravermelho é mais pra compostos orgânicos né? então tem essa possibilidade de estar conciliando... quando você vai para o cobre aqui no outro... seria ligações metálicas... seria mais complicado né?

QA2: tem gente que usa ((orbitais)) pra pós... que pode explicar as transições eletrônicas... oxidação-redução... eu não chego nesses modelos... fico mais na energia pra tirar um elétron ou ganhar um elétron no sistema

Lemes: seria mais os pares de elétrons... e os elétrons...

QA2: é... se ele tem a possibilidade de oxidar espécie ou reduzir... tira ou doa um elétron... mas eu não costumo chegar a explicar por orbitais moleculares... por que dá pra explicar por HOMO... LUMO né? dá pra fazer isso também... mas eu não utilizo

 QBQ1: (...) você tá vendo uma molécula de óxido de cobre... nada mais é... do que tirando uma série de fotos em instantes... e vendo qual a densidade de elétrons ao redor dessa molécula e conseguir diferenciar quais elétrons são provenientes de orbitais atômicos e quais são de orbitais moleculares... ou seja... são elétrons compartilhados daquela molécula... (...)

Lemes: você acha que a mesma ligação que está aqui no infravermelho é a mesma ligação que tá falando aqui de orbitais da densidade eletrônica?

QBQ1: em que sentido é o mesmo?

Lemes: por que por exemplo... aqui eu coloquei C traço H... eu coloquei esse traço... esse traço não representa o orbital...

QBQ1: não... isso não é a forma do orbital... a questão é/ nós tínhamos uma ideia... um modelo de como explicar que o carbono se ligava com o hidrogênio... daí depois de um tempo... foi feito um outro modelo que explicava mais coisas... não que esse modelo de traço... e ligação direta... não explica boa parte do que a gente conhece é que o outro explica um pouco mais... só que tanto é que esse modelo é útil... que a gente usa ele na maioria das coisas... os orbitais a gente usa pra pouca coisa... porque ele é mais complexo... porém mais abrangente... só isso/ é a questão do orbital... é que ambos ((modelo de traço e modelo de orbital)) pressupõem que existe uma densidade de elétrons e esses elétrons... de alguma forma... estão compartilhados... formando orbitais moleculares.... existe uma interconversão entre as teorias... só que elas não se sobrepõem totalmente... elas não são as mesmas

 QBQ2: (...) então a partir de um infravermelho é muito complicado você falar/ AH/ essa molécula é essa/ eu trabalho mais com espectrometria de massas... que é... ao meu ver... a técnica espectroscópica... espectrométrica mais fácil de todas... na verdade eu sentiria mais confortável com outros espectros juntos... então se eu tivesse o infravermelho e o RMN e alguma outra coisa pra interpretar... pra ir montando essa molécula... só infravermelho é pouca informação...

Lemes: aí eu mostrei aqueles dois artigos que falam de microscopia e tal... e eu não coloquei distribuição eletrônica ((como palavra chave para a escrita do parágrafo))?

QBQ2: NÃO/YES/ ((super contente))

(...)

QBQ2: não/ penso nela como ligações... agora parando pra refletir... é engraçado porque cada técnica te dá uma coisa... e você no fundo acaba ficando naquelas caixinhas e você nunca junta as coisas das técnicas... então infravermelho/ me deu a informação de vibração de ligação/ o RMN me deu informação ali do hidrogênio... da distância de três... e você nunca para pra juntar uma coisa com a outra... então você vai decifrando e continua preso dentro das caixinhas... por mais que você tenha várias técnicas pra chegar num todo... você continua travadinho no pensamento pequeno...() então eu acho que... a molécula... ela tá bem definida na sua mente/ mas o jeito de olhar eu acho que é diferente...até porque cada técnica você se importa com uma coisa/ então pro RMN... eu não tô nem aí se aquela ligação tá fazendo assim... se ela tá vibrando... eu não tô nem aí/ o que eu quero saber é se tem o hidrogênio ali/ o que mais da pra definir/ então você acaba olhando de jeitos diferentes... quando eu vou pro infravermelho... eu não tô nem aí se tem spin nuclear naquele negócio/ não importa/ não precisava saber que ele existia ((o spin nuclear)) pra fazer o infravermelho

 Lemes: aqui/ você relacionou as funções matemáticas com o espectro vibracional... mas quando a gente tá falando de infravermelho... a gente tá falando de ligação risquinho... não como orbitais não é?

QF1: sim... não sei se é um problema do químico... não sei se a gente foi criado assim... por eu não entendo por risquinho... eu já entendi já... já passou muito tempo na minha cabeça como risquinho... mas é muito mais do que isso né? é que é uma atração e repulsão eletrostática de cargas... basicamente/ claro/ o átomo tem um núcleo massivo... aí tem a eletrosfera... os elétrons... é por isso que eu falo do modelo que eu acredito... o movimento dessa atração e repulsão é que dá a característica desse espectro vibracional/ pra mim é isso

QF1: ((depois de ler de novo os excertos)) é assim né?... não é que...AH/ tem muita gente que fala... orbital não existe... é que... complicado...

Lemes: ((orbital)) não é só uma função matemática?

QF1: não... não... não é só... NOSSA/ poxa vida... se eu achar essa frase eu mando pra você...do... poxa vida... do... não sei se é do Schrödinger... acho que é...ele fala... assim... por que quando ele desenvolveu a mecânica quântica... era exatamente funções matemáticas... aí um cara lá... AH/ vamos tentar analisar um módulo quadrado aqui... e não sei o que... e bla blá blá... e sai essas figurinhas aqui...

Lemes: hunrum...

QF1: então tá/ então a função do orbital s é isso aqui... se eu fazer o módulo disso aqui e elevar ao quadrado vira uma esfera/ bom... pra equação do orbital s pro átomo de hidrogênio... é isso/ e Schrödinger falou que... tipo... se eu soubesse disso... ele não gostou do que o cara fez/ ele disse...AH/ vocês estão manipulando pra enxergar alguma coisa/ até por que a realidade é assim... essa equação quântica aqui... mas eu acho que é uma questão é que o físico não quer ver... enquanto que o químico vê/ não tá errado o que o cara fez ((o módulo da função de onda ao quadrado))... mas é um modelo que ele tá criando pra tentar visualizar e explicar as coisas com mais facilidade... então/ assim... então pra mim é essa a diferença... não é que orbital não existe... tem muita gente que fala ... AH/ orbital não existe... existe/ claro que existe ((o orbital))... só que é um conceito muito complexo... é difícil... até pra gente que tá aqui na pós-graduação... acho que é muito complexo...

(...)

Lemes: então os cálculos são pra que? por exemplo no sistema de combustão

QF1: então... o que eu faço? eu pego todo o sistema... na verdade a gente descreve... como é que eu vou explicar...

Lemes: descreve um comportamento?

QF1: exatamente/ o que a gente chama de superfície de energia potencial ... ou seja... é o movimento dessa molécula ... ou seja... desse arranjo de átomos... sobre um potencial ... ou seja... passa num mínimo...vai pro estado de transição... vem pra cá... pode se isomerizar pra lá... pra cá... então a gente estuda todos esses possíveis isômeros... certo? depois a gente usa umas ferramentas cinéticas... uns modelos cinéticos pra estudar... pra fazer o cálculo da constante de velocidade né? daí com isso... e mais uma coisinha ou outra... a gente pode falar assim ... ah... esse sistema se isomeriza pra cá e não pra lá ... ou seja... mais provável que venha pra cá e do que pra lá... a constante de velocidade é assim pra cá... assim pra lá... e assim vai

QF2: bom... temos aqui uma banda em mil setecentos e dois que a gente atribui pra carbonila...as bandas dois mil oitocentos e vinte e dois mil setecentos e trinta e oito que também está atribuído a uma carbonila... mil quinhentos e noventa e oito e mil quatrocentos e cinquenta e cinco temos uma ligação aqui...

interpretada como a ligação c dupla c do carbono aromático... bom... eu particularmente não chegaria a essa estrutura só com o infravermelho... essa técnica é muito boa pra você identificar grupos funcionais/ essa é uma banda característica de carbonila ((apontando para o espectro))... então eu diria... na molécula a única coisa que diria... bateria o olho ((no espectro)) e diria que na molécula tem uma ligação c dupla o... nas técnicas de elucidação estrutural... no caso... RMN de carbono e de hidrogênio... são boas informações... espectrometria de massas... dependendo da molécula também dá ótimas informações... e claro/ casar com infravermelho que ele dá os grupos funcionais e pode dar a posição desses grupos dependendo do espectro.... o RMN dá a posição do hidrogênio e a posição do carbono que fica mais fácil de identificar ... é difícil dizer a estrutura olhando uma única técnica... precisaria casar pelo menos três... eu gosto de usar o infravermelho... o RMN e o massas...

QF2: ((sobre o segundo trecho)) ÓTIMO/ eu sou cientista... a coisa não é só a parte física... tem bem mais do que isso... bom... deixa eu começar por essas duas aqui ((dois últimos trechos)) que são mais tranquilas de lidar... é fato... eu vejo a química como parte da física... a física estuda a matéria de uma forma geral... entre várias outras coisas... e a química... é a física da eletrosfera... eu costumo definir a química... como a física da eletrosfera... no fim das conta... nós nos atemos mais na parte da eletrosfera e interações eletrostáticas... de forças eletrônicas... claro que existem outras interações... mas as principais são Lemes: mas se a gente mede a variação da distância de ligação... por que a gente não pode medir o orbital? medir a distribuição eletrônica?

QF2: ah sim/ a gente pode medir a distribuição eletrônica... mas a distribuição eletrônica são vários orbitais... a ideia de vários orbitais...a gente usa o orbital só pra encaixar os elétrons... sabendo que os elétrons ocorrem emparelhados... com os spin opostos... direção de giro... vamos chamar de giro opostos... o que é isso fisicamente? como esses dois elétrons se comportam aí? para que serve esses espaços? onde esses elétrons estavam... ou é orbital... aí tem diferentes tipos de orbitais... pra diferentes tipos de ligações ou diferentes tipos de átomos... por exemplo... átomo de hidrogênio tem apenas orbitais s... átomo de carbono tem orbitais s e p e tals... ((os átomos)) estão em níveis eletrônicos diferentes... portanto... têm energias diferentes... então eles vão ter... espera-se... geometrias diferentes... a geometria em função da energia... como é essa geometria? a gente pode especular... especulamos como? usando a equação de Schrödinger que descreve os orbitais atômicos... mas é uma descrição matemática apenas...

Trecho do parágrafo escrito:

Os livros apresentam imagens que são somente representações da ligação, ou um gráfico matemático no caso da representação dos orbitais, e isso pode ajudar a entender o conceito abstrato, mas o professor (ou o livro) sempre deve chamar a atenção que aquilo é uma simples representação. Uma ferramenta que pode auxiliar é a utilização de “modelinhos” de átomos. Numa aula sobre infravermelho, por exemplo, é muito

difícil um aluno visualizar o estiramento em uma molécula na foto de um livro ou no slide de aula. Usando modelos de bolinhas mesmo, o professor pode mostrar em aula do que se trata o estiramento e outras vibrações no infravermelho. Isso ajuda a fixar o conceito da técnica.

Lemes: e aí você falou que... “ele tá observando uma imagem através de uma técnica... ninguém tá enxergando o átomo”... mas aí a imagem vai ser do que?

QI1: aquela imagem é um gráfico matemático que você está obtendo através de uma técnica... você não tá... por exemplo... no microscópio... você está visualizando ali a célula... você consegue visualizar as organelas... mas esses microscópios eletrônicos você não tá visualizando um átomo... aquilo é uma representação matemática... de uma técnica que te dá uma região com densidade que o átomo tá ali

Lemes: densidade...

QI1: densidade eletrônica ou... depende da técnica

 QI2: é... a questão de tipo de ligação né? se simétrico ou assimétrico... se ela é.... um tipo de estiramento né? ou é a questão da vibração da molécula né? tesoura todo aquele...

Lemes: então... quando você está usando... quando tá lá entendendo seus dados experimentais e tudo mais... você pensa na molécula em orbitais ou você pensa numa estrutura de bastão...

QI2: eu penso... na verdade... primeiro ... se eu quero dar uma aplicação... primeiro eu tenho que tentar pensar nos orbitais... pra depois ver qual o modelo de molécula que vai me dar aquela propriedade né? então... por exemplo... eu quero uma molécula quimioluminescente... com isso eu quero ver que tipo de molécula... que tipo de estrutura né? molecular... é uma molécula quimioluminescente... por exemplo... luminescente né? então... essas moléculas tem transições... é.... ligações duplas e simples né? então primeiro não tem como eu pensar... primeiro na molécula... pra depois na propriedade... eu primeiro penso na propriedade pra depois ver qual molécula que eu tenho que sintetizar ou comprar... que tenha o que eu quero né? não o contrário assim...

Trecho do parágrafo escrito:

(...) A carbonila quando possui grupos doadores de elétrons ligados à ela, influencia nas frequência dos espectros vibracionais, pois deslocam a densidade eletrônica para a carbonila. Ao contrário dos grupos doadores de elétrons, grupos retiradores de elétrons, ligados a carbonila tornam a ligação C=O mais polarizada, tornando a sobreposição dos orbitais mais efetiva favorecendo um ataque de um nucleófilo. (...)

Lemes: a distribuição da densidade eletrônica... quando você pensa no infravermelho... você também está pensando em... nas ligações C-H e tudo mais... você pensa em orbital ou você pensa em ligações mais simples? quando você vai falar da vibração da carbonila... grupos doadores de elétrons... ligação C-H da molécula... você está pensando em termos de orbitais?

QO1: não... em uma coisa mais simples

Lemes: mas aqui ((no parágrafo escrito)) você está falando em sobreposição de orbitais... aí você utiliza os orbitais pra explicar...

QO1: hunrum ((concordando)) ... ((uso orbital)) pra complementar... na verdade... ligação... pra ir um pouco além...

QO2: esse aqui é um espectro de infravermelho... um tipo de espectroscopia que nada mais é que a interação da energia com a matéria... tem vários tipos de interações... dependendo do comprimento de onda dessa energia... é um tipo de gráfico... é um tipo de interação e esse é específico do infravermelho... então basicamente é o que esse comprimento de onda... o que essa energia do infravermelho consegue fazer na molécula... o que ele consegue é as mudanças em estiramento... aumenta a distância da ligação... diminui... girar a molécula... e essas coisas é colocada na forma de um gráfico... aqui por exemplo é um benzaldeído ((apontou para a representação da estrutura da molécula))... e aqui a gente pode observar o espectro do infravermelho deste benzaldeído né? e no composto benzaldeído... pode observar nessa tabelinha abaixo... ele seleciona alguns sinais específicos que absorvem a energia... então de acordo com o espectro né? carbonila... dois tipos de estiramentos de carbonila.. carbono aromático que é carbono S-P dois... e assim você consegue tirar informações sobre a molécula... obviamente não da pra definir uma molécula pelo infravermelho... mas tira informações e todas as informações são úteis né? e aqui tem um cálculo de índice de deficiência de hidrogênio.. que é um calculo que se faz pra saber o índice de insaturação... que ajuda também definir a molécula... quanto mais informações sobre a molécula... melhor...

QO2: sim... os orbitais têm lá... mas a visualização dos orbitais é que... vamos dizer... é algo ... até que muita gente nem gosta muito de estudar... exatamente por que é algo que tem que imaginar um pouco... tem que forçar a mente pra tu conseguir enxergar e tentar tirar uma ideia de como funciona... mas isso é tudo com base em estudos com equipamentos modernos... obviamente eles não fornecem as formas bonitas... são gráficos... muito matemático... mas depois a gente sempre tenta simplificar... ver o lado... assim... qualitativo da coisa... por exemplo isso né? tem um impedimento estérico... tem um volume muito grande... uma densidade eletrônica muito grande que impede... e aí a gente tenta botar isso em uma maneira... tanto... quem fez o experimento... pras pessoas possam entender né? então esse é o ponto chave/ tornar aquela informação numa maneira mais acessível a todos né?

Trecho do parágrafo escrito:

A técnica de infravermelho é um método espectroscópico que utiliza a irradiação na faixa do infravermelho para enxergar diversos tipos de estiramento, distribuição eletrônica, tipos de orbitais presentes numa ligação, distância de ligação entre outros parâmetros presentes nas moléculas (...)

Lemes: aqui quando você fala da interação da energia com a matéria... com a molécula... e aí vai ter a carbonila e tudo mais... quando estamos aqui ((transcrição da 1ª entrevista)) falando de estrutura da molécula... de orbitais d... distribuição eletrônica de orbitais e tal... quando você está pensando no infravermelho... especificamente... você está pensando em orbitais... como você disse aqui ((texto da segunda entrevista))... ou você está pensando em uma ligação mais simples?

QO2: eu penso numa ligação mais simples... por que é difícil a gente já de início pensar em orbital... pra mim é difícil... então eu penso naquela ligação mais simples e depois... se há necessidade pra entender o efeito... sei lá... o estudo em questão... aí eu começo tentar entender pro lado mais do orbital... que tipo de orbital é s... p... d... mas eu... de início... já penso na ligação simples né? só uma junção de dois átomos... algo mais simples...

QO2: bom... é que orbitais... no meu ponto de vista... eu acho que... é algo que a gente aprende... mas muito na parte qualitativa... a gente não entra a fundo na parte de orbitais... até porque orbitais requer conhecimento matemático bem grande... coisa que por exemplo... eu não tenho/ agora... no aspecto mais qualitativo... a gente tem uma noção de orbitais/ agora a gente aplicar esse conhecimento de orbitais em outras técnicas... é DIFÍCIL/ não é todos que dominam esse tipo de conhecimento... são poucos... então... por isso... eu... pra mim... quando eu falo de ligação... eu imagino sempre lá... um pontinho ligando dois átomos né? orbitais... se fala... mas é depois que você tem um conhecimento maior da técnica... e tudo mais...

QO2: é... mas assim... você não precisa ter um conhecimento afimco de orbitais... pra entender a técnica de infravermelho.... obviamente ajuda... e é bom... mas não precisa