UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

INSTITUTO DE QUÍMICA

INSTITUTO DE BIOCÊNCIAS

FACULDADE DE EDUCAÇÃO

EVANDRO FORTES ROZENTALSKI

FEUSP

**O estatuto ontológico e
epistemológico do conceito de orbital
em livros didáticos de Química Geral
no século XX: *uma análise de seus
fundamentos, suas representações e
implicações para a aprendizagem***

**São Paulo
2013**

EVANDRO FORTES ROZENTALSKI

O estatuto ontológico e epistemológico do conceito de orbital em livros didáticos de Química Geral no século XX: *uma análise de seus fundamentos, suas representações e implicações para a aprendizagem*

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

Área de Concentração: Ensino de Química

Orientador: Prof. Dr. Paulo Alves Porto

**São Paulo
2013**

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e de pesquisa, desde que citada a fonte.

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

Rozentalski, Evandro Fortes

O estatuto ontológico e epistemológico do conceito de orbital em livros didáticos de química geral no século XX: uma análise de seus fundamentos, suas representações e implicações para a aprendizagem. – 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: Ensino de Química

Unitermos: 1. Química (Estudo e ensino); 2. Ensino de química; 3. Material didático; 4. Filosofia da ciência; 5. Semiótica.

USP/IF/SBI-101/2013

Nome: ROZENTALSKI, Evandro Fortes

Título: O estatuto ontológico e epistemológico do conceito de orbital em livros didáticos de Química Geral no século XX – uma análise de seus fundamentos, suas representações e implicações para a aprendizagem

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

Área de Concentração: Ensino de Química

Aprovado em:

Banca Examinadora

Prof. Dr. _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

*À minha família, Jorge, Leduvina e Vanessa,
respectivamente, pai, mãe e irmã,
pilares humanos que
construíram, mantêm e guiam o meu ser.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço aos meus pais, Jorge Rozentalski e Leduvina Fortes Rozentalski, e à minha irmã, Vanessa Fortes Rozentalski, pelo apoio incondicional em tudo o que escolho para a minha vida. Nos momentos de desilusão, medo, hesitação e angústia que sofri durante este mestrado, foram em vocês que pensei para me manter aqui. Até o fim da minha vida estarei em débito com vocês!

Ao meu orientador, Prof. Paulo Alves Porto, por possuir duas dimensões nas quais a maioria das pessoas carece em ter concomitantemente no mundo acadêmico – a excelência tanto humana quanto pesquisadora. A primeira diz respeito à sua educação impecável, não só para com a minha pessoa, mas com todos os que o cercam. Enquanto que a segunda se refere à liberdade intelectual que esse proporciona aos seus orientandos, mas sem deixá-los a mercê da própria sorte, indicando os limites e caminhos mais adequados para que esses possam se desenvolver em plenitude.

À Prof^a. Joanez Aires, da UFPR, que tornou possível este caminho que tomei em direção à pós-graduação na área de Ensino de Química. Ela plantou a semente que, agora, começa a dar os primeiros frutos. Agradeço por todo o carinho e interesse ofertado desde que vim para São Paulo. Estes laços nunca se romperão, independente do tempo-espço!

Ainda da UFPR, não poderia deixar de agradecer ao Prof. Márcio Peres de Araujo e ao seu grupo de pesquisa do Laboratório de Inorgânica Aplicada (LIA), o qual fiz parte por mais de três anos durante a graduação. Nunca vou esquecer suas palavras de incentivo quando lhe disse que aprofundaria os estudos na área de Ensino de Química. Deste grupo, ainda gostaria de lembrar os nomes de Chico Fagundes, Deividi Cavarzan, Fabio Caetano, Juliana Paula da Silva, Otávio Fungati, dentro outros, pelo apoio no caminho escolhido.

Agradeço a Leandro Blachechen, companheiro de graduação na UFPR e aluno de doutorado do Instituto de Química desta universidade, por me hospedar durante todas as etapas do processo seletivo do mestrado e, também, oferecendo toda a ajuda necessária para me locomover por São Paulo e pela Universidade de São Paulo.

À Antonio Gustavo Sampaio, doutor em Química teórica por esta universidade, por toda a ajuda despendida quando eu fiz a disciplina de Química Quântica. Agradeço imensamente a ele, pois eu realmente o importunei em inúmeras oportunidades. Apesar disso, sempre se

mostrou solícito e interessado em ajudar! Também não posso deixar de agradecer por toda a ajuda que ele me deu aqui em São Paulo e pelos esclarecimentos sobre o Instituto de Química, a Universidade de São Paulo e todas as minúcias formais a respeito de se ter uma bolsa FAPESP.

Meus sinceros agradecimentos a todos os colegas do Grupo de História da Ciência e Ensino de Química (GHQ), especialmente aos colegas Zé Otávio, Anielli Lemes, Karina Aparecida e Elisa Cristina, Winston Schmiedecke, Mariana Côrrea, pelas contribuições diretas e indiretas a esta dissertação. Além disso, sou muito grato por fazer parte deste grupo, visto todo o crescimento humano e acadêmico que esse me proporcionou desde que me tornei membro dele. Espero que esse elo se mantenha *ad infinitum*.

Aos meus amigos da república Zimbabwe, Lucas Jara, Gustavo Junqueira, Alex Nogueira, Mariana Guedes, Luís Fernandes e Jasmin Lindner. Nessa república encontrei tranquilidade, respeito e companheirismo necessários para o desenvolvimento desta dissertação. Os navegantes de primeira viagem sabem bem o quão difícil é encontrar um lugar assim na cidade de São Paulo. Agradeço a todos os que moram ou moraram aqui por tornarem este lugar especial.

Aos colegas do Programa Interunidades em Ensino de Ciências, especialmente aos companheiros Alexandre Bagdonas e André Nascimento pelos trabalhos em conjunto desenvolvidos e às discussões históricos-sociológicas-filosóficas-axiológicas oriundas desses trabalhos.

Aos Professores Osvaldo Pessoa Jr., Marcelo Giordan e Ivã Gurgel pelas contribuições a esta dissertação. Suas sugestões, críticas e reflexões enriqueceram não só a dissertação em si, mas, também, a formação deste que vos agradece.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela concessão da bolsa de mestrado e pelo apoio financeiro para a realização desta pesquisa.

Ao Prof. Ronny Rocha Ribeiro da Universidade Federal do Paraná, primeiramente, pelo apoio incondicional quando disse que viria a São Paulo e, posteriormente, pelo inestimável auxílio prestado quando lhe solicitei ajuda durante o mestrado. Nunca vou me esquecer disso, visto que em nenhum momento você hesitou em prestar esse auxílio. Agradeço a confiança depositada em mim.

Aos meus amigos espalhados pelo Brasil, uma parte em Foz do Iguaçu-PR (Augusto Schultz, Abel Chang, Leonardo Chalhoub, Bruno Patrick, Alexandre Burilli e Talini Trich), outra em Curitiba-PR (Julio Rocha, Tatiane Correa, Fernando Botton, Victor Hugo, Gustavo Lima, Fábio Lisboa, Luiz Matheus, Robson Lisboa, Hudson Gatto, dentre outros que estou esquecendo com toda a certeza) e um, ainda, em Joinville-SC (Eliseu Matubara).

Por fim, mas não menos importante, destaco três mulheres que observaram de perto, cada qual com suas particularidades, toda ou parte da trajetória que culminou na confecção desta dissertação. Primeiramente, a aluna de Doutorado em Ensino de Química, Anielli Lemes, dado que ela acompanhou desde os primórdios esta dissertação. Sua presença nos meios digitais, particularmente os *chats virtuais*, fez com que as discussões e troca de referências sobre Filosofia da Química, Filosofia da Ciência, História da Ciência, ensino, dentre outros assuntos, ocorressem com facilidade, dependentes apenas das pontas dos dedos e do ânimo deste que vos escreve, afinal de contas, quem conhece a supracitada, sabe bem que ali reside uma energia capaz de quebrar as ligações químicas mais estáveis da Natureza.

A segunda mulher que destaco é a aluna de mestrado em Ensino de Química Camila Miranda, que suportou bravamente meus momentos de insanidade ao cursar a disciplina de Química Quântica, me incentivando e animando não só naquele momento, mas, também, em outros que se seguiram. Aprendi muito a respeito de representações sociais e identidade docente.

Por último, ou melhor, última, agradeço à aluna de mestrado em Ensino de Física Luciene Fernanda pelo companheirismo acadêmico e pessoal que construímos no último ano. Nossas discussões abarcam um amplo espectro, maior que o próprio espectro eletromagnético, tamanha é a diversidade de temas que colocamos no divã para a reflexão. São esses momentos informais que nos fazem arquitetar e (re)construir nossas concepções, conduzindo-as a um novo patamar de entendimento.

Não entendo

Não entendo. Isso é tão vasto que ultrapassa qualquer entender.

Entender é sempre limitado.

Mas não entender pode não ter fronteiras.

Sinto que sou muito mais completo quando não entendo.

Não entender, do modo como falo, é um dom.

Não entender, mas não como um simples de espírito.

O bom é ser inteligente e não entender.

É uma benção estranha, como ter loucura sem ser doido.

É um desinteresse manso, é uma doçura de burrice.

Só que de vez em quando vem a inquietação: quero entender um pouco.

Não demais. Mas pelo menos entender que não entendo.

Clarice Lispector (1920-1977)

*A linguagem é um conceito fluido
e pode ser comparada
a um mar tempestuoso
de significados contraditórios
e interpretações múltiplas.*

Jacques Derrida (1930-2004)

RESUMO

ROZENTALSKI, E. F. **O estatuto ontológico e epistemológico do conceito de orbital em livros didáticos de Química Geral no século XX: uma análise de seus fundamentos, suas representações e implicações para a aprendizagem.** 2013. 167 f. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física, Instituto de Química, Instituto de Biociências e Faculdade de Educação – Programa Interunidades em Ensino de Ciências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

Um dos tópicos discutidos no âmbito da Filosofia da Química diz respeito ao realismo científico dos conceitos químicos, como, por exemplo, o conceito de orbital. O estatuto ontológico (referência ou não à realidade) dos orbitais passou a ser objeto de intenso debate a partir de 1999, quando da publicação do trabalho de Zuo e colaboradores, corroborado sem maiores ressalvas pelo editorial da revista *Nature*, no qual se afirmava que *orbitais haviam sido observados diretamente*. Nesse debate, não apenas aspectos ontológicos foram levantados, mas, também, aspectos epistemológicos em relação a esse conceito (o que é o orbital e a possibilidade de observá-lo). Esses aspectos têm implicações para a Química e, especialmente, para o Ensino de Química. Diante disso, esta dissertação tem como objetivo investigar como o conceito de orbital foi apresentado nos livros didáticos de Química Geral voltados para o Ensino Superior, ao longo do século XX. Foram selecionados livros didáticos utilizados no Brasil nesse período, por meio da identificação simultânea nas seguintes bases de dados: os catálogos das bibliotecas da Universidade de São Paulo (USP); da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ); e do *site* Estante Virtual, que reúne os acervos de vários sebos brasileiros. Foram selecionados e investigados 26 livros didáticos de Química Geral, abrangendo o período de 1911 a 2001. Por meio das investigações nos livros e dos referenciais que orientaram essa pesquisa, delimitamos as seguintes categorias visando sistematizar e analisar os dados: *base conceitual do orbital*; *representação icônica do orbital*; e *representação simbólica do orbital*. A primeira se ampara principalmente, mas não somente, nos debates sobre o estatuto ontológico e epistemológico do orbital relatados na literatura. As duas últimas se baseiam na semiótica peirceana. O conceito de orbital começa a ser introduzido e discutido nos livros de Química Geral por volta da segunda metade do século XX. Na primeira categoria, nota-se que boa parte dos livros define o orbital como se referindo a uma região na qual é mais provável se encontrar o elétron, em termos de densidade de probabilidade. Para alguns filósofos da química, essa compreensão é um indício de uma apreensão peculiar da Mecânica Ondulatória por parte dos químicos. Na segunda categoria, as imagens dos orbitais, cuja característica semiótica se refere à representação de qualidades do orbital, como sua forma, são, em sua maioria, identificadas como as regiões de densidade de probabilidade elevada, representadas por superfícies contínuas e uniformes. Essas representações parecem sugerir um papel secundário ao elétron. Por fim, na terceira categoria, cuja característica semiótica consiste em convencionar previamente ao leitor o seu significado, constata-se que os orbitais são representados por linhas horizontais ou caixas, e os elétrons por setas, sugerindo duas entidades distintas. Essa compreensão implica que orbitais preenchidos e vazios possuem igualdade ontológica. Observa-se, assim, que o conceito de orbital é introduzido nos livros de Química Geral do século XX de maneira não problematizada, tanto do ponto de vista conceitual quanto dos significados e sentidos das diferentes representações desse conceito.

Palavras-chave: Filosofia da Química. Semiótica. Livros didáticos. Orbital. Ensino Superior.

ABSTRACT

ROZENTALSKI, E. F. **Ontological and epistemological status of the concept of orbital in twentieth-century General Chemistry textbooks:** an analysis of its foundations, its representations and implications for learning. 167 f. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física, Instituto de Química, Instituto de Biociências e Faculdade de Educação – Programa Interunidades em Ensino de Ciências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

One of the topics discussed in the Philosophy of Chemistry is the scientific realism of chemical concepts, such as the concept of orbital. The ontological status (reference to reality or not) of orbitals became the subject of intense debate as from 1999, when a paper by Zuo and colleagues was published and supported without major precautions by an editorial of the journal *Nature*, which stated that *orbitals had been observed directly*. In such debate, both ontological and epistemological aspects were raised, about what orbitals are, and the possibility of observing them. These points have implications for Chemistry and especially for Chemical Education. This research aims to investigate how the concept of orbital was presented in undergraduate General Chemistry textbooks throughout the twentieth century. Textbooks used in Brazil during that period were selected by simultaneous identification in the following databases: the catalogs of the libraries of the University of São Paulo (USP), Federal University of Rio de Janeiro (UFRJ), and the site *Estante Virtual* which gathers the collections of several Brazilian bookstores. Twenty-six General Chemistry textbooks were selected and investigated, covering the period from 1911 to 2001. Analysis of the textbooks, based on the selected theoretical framework, resulted in the following categories: *conceptual basis of the orbital*; *iconic representation of the orbital*, and *symbolic representation of the orbital*. The first is mainly, but not only, based in the debates about the ontological and epistemological status of the orbital in the literature. The last two are based on Peircean semiotics. The concept of orbital began to be introduced and discussed in General Chemistry textbooks in the second half of the twentieth century. In the first category, it is noted that most of the textbooks define the orbital as a region in which it is more likely to find the electron, in terms of probability density. For some philosophers of chemistry such understanding is an indication of a peculiar appropriation of Wave Mechanics by chemists. In the second category, the images of orbitals whose characteristic semiotics consists in the representation of qualities such as their shape are mostly identified as areas of high probability density, and represented by continuous and uniform surfaces. These images convey a secondary role to the electron. Finally, in the third category, whose characteristic semiotics consists in conventionalizing the sign meaning beforehand to the reader, it is verified that orbital diagrams, in which orbitals are represented by horizontal lines and electrons by arrows, suggest that orbitals and electrons are two distinct entities. Such conception implies the understanding that filled and empty orbitals have ontological equality. In conclusion, the analysis show that the concept of orbital is introduced by twentieth-century General Chemistry textbooks in a non-problematized manner, if one considers both the conceptual standpoint and the meanings of the different representations of the concept.

Keywords: Philosophy of chemistry. Semiotics. Textbooks. Orbital. Higher Education.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	14
CAPÍTULO 1 – FILOSOFIA DA QUÍMICA: UM NOVO OLHAR PARA A COMPREENSÃO DOS SABERES E FAZERES DA QUÍMICA E DO ENSINO DE QUÍMICA	17
1.1. <i>Uma disciplina ainda incipiente</i>	17
1.2. <i>A Filosofia da Ciência no século XX e sua relação com a Química: a negligenciada Filosofia da Química.....</i>	17
1.3. <i>Justificativas para que as investigações filosóficas da Química tenham sido negligenciadas</i>	19
1.3.1. Contexto de formação dos filósofos no século XIX	19
1.3.2. Ideal kantiano de ciência.....	19
1.3.3. Campanhas anti-químicas e ausência de crises na disciplina de Química	19
1.3.4. Visão reducionista da Química em relação à Física	20
1.4. <i>Pela autonomia da disciplina de Filosofia da Química</i>	21
1.4.1. Argumentos contra o reducionismo da Química em relação à Física	21
1.4.2. A necessidade de aproximações sinérgicas entre Filosofia e Química	22
1.4.3. Perspectivas de pesquisa em Filosofia da Química	24
1.5. <i>Um novo olhar sobre o Ensino de Química</i>	25
CAPÍTULO 2 – O ESTATUTO ONTOLÓGICO E EPISTEMOLÓGICO DO ORBITAL NA LITERATURA.....	28
2.1. <i>Realismo científico x antirrealismo científico: diferentes perspectivas sobre a relação entre teorias e realidade.....</i>	29
2.1.1. Teses gerais defendidas por um realista científico.....	29
2.1.2. Teses gerais defendidas por antirrealistas científicos	30
2.1.3. Argumentos em favor do antirrealismo científico.....	30
2.1.4. Argumentos em favor do realismo científico.....	31
2.1.5. As implicações do realismo científico para a Química e para o Ensino de Química	31
2.1.5.1. O exemplo da configuração eletrônica	32
2.1.5.2. O exemplo da estrutura molecular.....	32

2.2. <i>Não existem coisas tais como orbitais – os debates no Journal of Chemical Education</i>	33
2.2.1. Um consenso quanto à não existência do orbitais	33
2.2.2. O conceito de orbital em cursos introdutórios de Química Geral – a controvérsia... ..	35
2.2.3. Características gerais deste debate	36
2.3. <i>Orbitais foram observados diretamente? – O caso da revista Nature</i>	37
2.3.1. Sobre o trabalho que originou a controvérsia e sua repercussão na comunidade científica	37
2.3.2. Orbitais existem? Eles podem ser observados? – um debate na literatura	40
2.3.2.1. O que é um orbital?	41
2.3.2.2. Qual o estatuto ontológico de descrições exatas e aproximadas de orbitais?	44
2.3.2.3 Orbitais podem ser observados?	52
2.3.2.4. Qual o significado das imagens de orbitais divulgadas pela Nature? ...	57
2.3.2.5. Orbitais existem? – uma resposta filosófica a essa questão.....	59
CAPÍTULO 3 – LIVROS DIDÁTICOS	63
3.1. <i>Livros didáticos para o Ensino Superior: objetos ainda pouco investigados</i>	63
3.2. <i>Características e objetivos (explícitos e implícitos) dos livros didáticos</i>	63
CAPÍTULO 4 – SEMIÓTICA QUÍMICA	66
4.1. <i>Representações: construção e divulgação do conhecimento químico</i>	66
4.2. <i>Semiótica: um referencial para se analisar as representações da Química</i>	66
4.2.1. Semiótica: um campo que investiga linguagens verbais e não-verbais	66
4.2.2. A semiótica peirceana.....	67
4.2.2.1. Três categorias universais de apreensão e tradução da realidade: <i>primeiridade, secundidade e terceiridade</i>	68
4.2.2.2. A construção de significado por meio da tríade: <i>signo, objeto e interpretante</i>	68
4.2.2.3. Uma tricotomia relacional entre signo e objeto: ícone, índice e símbolo	70
4.3. <i>O olhar semiótico sobre os livros didáticos</i>	74

4.3.1. As imagens dos livros didáticos: função e organização.....	74
4.3.2. Natureza semiótica das imagens	75
CAPÍTULO 5 – METODOLOGIA.....	77
5.1. <i>Seleção dos livros didáticos de Química Geral para o Ensino Superior.....</i>	<i>77</i>
5.2. <i>Estrutura da análise dos livros didáticos.....</i>	<i>79</i>
CAPÍTULO 6 – RESULTADOS E DISCUSSÃO	84
6.1. <i>Sobre os livros didáticos investigados</i>	<i>84</i>
6.1.1. Origem: a primazia dos livros estadunidenses	84
6.1.2. Idioma: primazia de traduções para a língua portuguesa	85
6.1.3. Público alvo: químicos e profissionais de áreas correlatas.....	86
6.1.4. Ausência de requisitos particulares.....	87
6.1.5. Objetivos didáticos-pedagógicos: o ensino dos princípios da Química.....	88
6.2. <i>Quando o conceito de orbital foi introduzido nos livros de Química Geral?</i>	<i>89</i>
6.2.1. Período 1911-1932: um conceito ainda em gestação	90
6.2.2. Período 1939-1946: um conceito ainda a ser divulgado.....	90
6.2.3. Período 1950-2001: introdução e estabelecimento do conceito de orbital.....	91
6.3. <i>Base conceitual do orbital</i>	<i>94</i>
6.3.1. Considerações ontológicas e epistemológicas sobre a Mecânica Ondulatória	94
6.3.1.1. Origens e fundamentos da Mecânica Ondulatória	94
6.3.1.2. Os constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória	94
6.3.1.3. Descrições <i>exatas</i> e <i>aproximadas</i> da equação de Schrödinger.....	96
6.3.1.4. A função de onda Ψ não possui significado físico.....	99
6.3.2. O orbital entendido como a <i>densidade de probabilidade</i>	102
6.4. <i>Representação icônica do orbital.....</i>	<i>110</i>
6.4.1. Representações de orbitais como regiões de densidade de probabilidade máxima: entidades independentes do elétron?	110
6.4.2. Uma ambiguidade: afinal, o que é o orbital?	120
6.4.3. Diferentes formas dos lobos dos orbitais p	123

6.4.4. Representações icônicas de <i>orbitais vazios</i> : entidades independentes dos elétrons.....	125
6.4.5. Como são obtidas ou produzidas as imagens dos orbitais: questões em aberto	127
6.5. <i>Representação simbólica do orbital</i>	129
6.5.1. Equações matemáticas e seu caráter meramente ilustrativo.....	129
6.5.2. Diagramas: multiplicidade de aplicações	135
6.5.2.1. Diagramas de orbitais	139
6.5.2.1.1. A manifestação simbólica dos diagramas de orbitais	142
6.5.2.1.2. A equivalência ontológica entre orbitais vazios e preenchidos	143
6.5.2.2. Diagramas de energia de orbitais.....	147
6.5.2.2.1. Diagramas de energia de espécies monoelétrônicas	150
6.5.2.2.2. Diagramas de energia de espécies polieletrônicas.....	152
6.6. <i>As relações entre as categorias investigadas: subsídios para a construção de representações e comunicação do conhecimento químico</i>	156
CAPÍTULO 7 – CONSIDERAÇÕES FINAIS	158
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	161

INTRODUÇÃO

O conceito de orbital é central no Ensino de Química para a compreensão da *estrutura da matéria* e, principalmente, das teorias quânticas sobre a ligação química, a saber, a Teoria de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria de Orbitais Moleculares (TOM). A partir da introdução de compreensões sobre o orbital, químicos e professores de química manipulam os diferentes orbitais – apresentados em simulações, modelos moleculares ou no papel como possuindo *formas, tamanhos e natureza direcional* bem definida – para, por exemplo, prever geometrias moleculares, e explicar que a *sobreposição de orbitais* com simetrias e energias adequadas leva à formação da ligação química. Nesse contexto, há a sugestão da *realidade* não só dos orbitais, mas, também, de suas *formas, tamanhos e natureza direcional*. Ou seja, orbitais são compreendidos e manipulados *tal como (supostamente) são na Natureza*. Tal entendimento se perpetua mesmo em níveis avançados da formação de químicos. Por exemplo, Lemes (2013) verificou que doutorandos das diferentes áreas da química (Inorgânica, Orgânica, Analítica, Físico-Química e Bioquímica), em sua maioria, não só acreditam na realidade da existência de orbitais, como, também, na *forma* que é comumente atribuída a esses – particularmente a oriunda de livros didáticos.

Em vista disso, esta dissertação tem por objetivo principal responder à seguinte questão: *Como o conceito de orbital foi apresentado nos livros didáticos de Química Geral voltados para o Ensino Superior, ao longo do século XX?*

Acreditamos ser relevante essa análise, considerando haver, ainda, relativamente poucas pesquisas referentes a livros didáticos do Ensino Superior e, especificamente, de Química. Assim, esta dissertação poderá contribuir também para avaliar o papel dos livros didáticos na divulgação das compreensões sobre o orbital, observadas anteriormente entre químicos, professores de química e estudantes de química, e descritas na literatura.

Para responder à questão que orienta esta dissertação, perguntas específicas foram construídas:

Qual estatuto ontológico (referência ou não à realidade) e epistemológico é atribuído ao conceito de orbital nos livros didáticos de Química Geral do Ensino Superior?

Quais compreensões ontológicas e epistemológicas são transmitidas pelas diversas representações empregadas para comunicar o conceito de orbital?

Há diferenças importantes na forma com que o conceito de orbital foi sendo apresentado no decorrer do século XX?

A questão do estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais é um tema atual, que tem sido amplamente discutido no âmbito da Filosofia da Química, especialmente após a publicação de trabalhos que afirmam ter sido possível obter *fotografias* de orbitais atômicos. Questões como essa, relacionadas ao *realismo científico*, têm implicações para a Química e, mais especificamente, para o Ensino de Química. Além disso, o desenvolvimento recente da Filosofia da Química, como subárea autônoma da Filosofia da Ciência, aponta para a atualidade da análise filosófica da ciência Química para a identificação e compreensão das particularidades dessa ciência, e suas implicações para o Ensino de Química.

Além disso, tendo em vista o uso de *representações* particulares por parte da ciência Química para *comunicar, representar e manipular* – mentalmente e no papel – seus objetos, fenômenos e processos de estudo, faz-se necessário compreender como os livros de Química Geral do século XX expõem aos estudantes o significado das diferentes representações para os orbitais, e como se dá o trânsito entre elas.

Tendo isso em vista, a presente dissertação foi estruturada como segue. No **Capítulo 1**, apresentamos ao leitor a disciplina de Filosofia da Química que, apesar de ainda incipiente, tem nos brindado não só com compreensões sobre o que é a Química e como ela funciona, mas também tem apontado para implicações e contribuições para o Ensino de Química. Nosso objetivo é apresentar, sucintamente, as origens dessa disciplina, as motivações para seu nascimento tardio, as reflexões que ela trouxe até aqui para a Química e o Ensino de Química, e alguns dos tópicos atuais de pesquisa nessa área.

O **Capítulo 2** compila os debates das duas últimas décadas em relação ao estatuto ontológico e epistemológico do orbital na literatura. Destacamos, primeiramente, que esses debates abarcam o tópico denominado de *realismo científico*, o qual trata, dentre outros aspectos, da realidade dos referentes das entidades teóricas empregadas pelas teorias científicas – o que, por sua vez, reflete no nosso modo de ensinar e aprender química. São introduzidos, em seguida, dois debates travados em periódicos de Química, Ensino de Química, Filosofia da Química e Filosofia da Ciência, a respeito da existência ou não dos orbitais, da possibilidade de observá-los, bem como outros aspectos relacionados a esse conceito.

O **Capítulo 3** faz um breve apanhado das pesquisas que têm como objeto de estudo os livros didáticos – de Ensino Médio e Superior –, bem como a importância e a função dos livros didáticos na formação de cientistas.

No **Capítulo 4**, salientamos a importância das *representações* na *construção e divulgação* do conhecimento químico no âmbito da pesquisa em Química e, principalmente, no Ensino de Química, por meio de uma abordagem fundamentada na *semiótica peirceana*. Discutimos a importância das linguagens não-verbais, e aspectos dos conceitos centrais da

semiótica peirceana, como *primeiridade*, *secundidade* e *terceiridade*, a tríade objeto-signo-interpretante, e a classificação dos signos (ou representações), enfocando a que trata a relação do signo com objeto – *ícone*, *índice* e *símbolo*.

Os quatro capítulos descritos até aqui se somam para edificar o referencial teórico desta dissertação, que orienta a construção da metodologia de pesquisa no **Capítulo 5**. Neste capítulo relatamos, primeiramente, a metodologia empregada na seleção dos livros didáticos de Química Geral para o Ensino Superior no século XX. Depois, apresentamos a estrutura de análise concebida para *sistematizar* e *analisar* o conceito de orbital nos livros. Essa estrutura se baseia, principalmente, nos referenciais teóricos delineados nos **Capítulos 2 e 4**, culminando na proposição de três categorias para analisar a apresentação do conceito de orbital nos livros didáticos: *base conceitual do orbital*; *representação icônica do orbital*; e *representação simbólica do orbital*.

A apresentação e a discussão dos resultados são feitas no **Capítulo 6**, tendo em vista as categorias propostas no **Capítulo 5**. Os subtítulos do capítulo 6, sempre que possível e pertinente, objetivam oferecer ao leitor uma síntese do resultado a ser apresentado e discutido.

Por fim, no **Capítulo 7**, apontamos considerações gerais levantadas pela dissertação, tais como as implicações para a Química e, especialmente, para o Ensino de Química, e indicações de pesquisas futuras que tomam como marco aspectos delimitados, mas não aprofundados, por esta dissertação.

CAPÍTULO 1 – FILOSOFIA DA QUÍMICA: UM NOVO OLHAR PARA A COMPREENSÃO DOS SABERES E FAZERES DA QUÍMICA E DO ENSINO DE QUÍMICA

1.1. Uma disciplina ainda incipiente

A Filosofia da Química, como subárea da Filosofia da Ciência, é uma disciplina relativamente recente, tal como apontou Labarca (2010) em seu trabalho *Filosofía de la Química: a poco más de diez años de su nacimiento*. Esse autor toma como marcos de institucionalização da Filosofia da Química a criação, em 1997, da *International Society for the Philosophy of Chemistry (ISPC)*¹, que, a partir desse mesmo ano, começou a organizar simpósios anuais; e o surgimento de dois periódicos especializados, *Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry*² (desde 1995, editada por Joachim Schummer) e *Foundations of Chemistry*³ (desde 1999, editada por Eric Scerri).

Podemos considerar que a Filosofia da Química se encontra em sua infância⁴, se tomarmos como parâmetro de desenvolvimento, apenas, as datas de criação dos marcos institucionais citados anteriormente e, portanto, deixando de lado toda a produção acadêmica anterior àquelas datas. Entretanto, apesar de sua recente fundação, segundo Labarca (2010), a Filosofia da Química apresentou o maior crescimento dentro da Filosofia da Ciência nos últimos 15 anos⁵, evidenciando, dessa forma, a fecundidade de questões sobre as quais ela pode se debruçar.

Uma questão que surge quase imediatamente após essas considerações é: *Qual a explicação para o nascimento tão tardio da Filosofia da Química como subárea da Filosofia da Ciência?*

1.2. A Filosofia da Ciência no século XX e sua relação com a Química: a negligenciada Filosofia da Química

¹ Na página eletrônica da ISPC é apresentado que “as preocupações da Filosofia da Química surgem tanto de questões internas decorrentes dos métodos, conceitos e ontologia única da Química, bem como de questões tradicionais na Filosofia da Ciência, abordados por uma perspectiva química” (<http://ispc.sas.upenn.edu/> - Acesso em: 24 de jun. 2011).

² <http://www.hyle.org/> - Acesso em: 24 de jun. 2011.

³ <http://www.springerlink.com/content/103024/> - Acesso em: 24 de jun. 2011.

⁴ Schummer (2006) corrobora essa visão, ao apontar que a maturidade de um campo pode ser avaliada pelos tópicos estudados, e que, no caso da Filosofia da Química, a maioria dos tópicos caracteriza-se por serem tópicos de infância.

⁵ Segundo Schummer (2006), mais de 700 artigos e aproximadamente 40 monografias foram produzidas em Filosofia da Química desde 1990.

Primeiramente, é importante apresentar um panorama sobre a produção de trabalhos em Filosofia da Ciência cujo interesse resida essencialmente na Química. Scerri e McIntyre (1997) indicaram que uma rápida revisão da literatura em Filosofia da Ciência, principalmente no período anterior à criação dos periódicos especializados em Filosofia da Química, resultava na identificação majoritária de trabalhos de duas subdisciplinas da filosofia da ciência, a *filosofia da física* e a *filosofia da biologia*⁶.

No que diz respeito à Filosofia da Física no século XX, essa se concentrou, majoritariamente, nas questões oriundas da Mecânica Quântica, relatividade e espaço-tempo (CARTWRIGHT, 1979 *apud* SCERRI & MCINTYRE, 1997).

Diferentemente da Filosofia da Física, a Filosofia da Biologia é uma disciplina relativamente recente, de forma que a Filosofia da Ciência do século XX se caracterizou por ser essencialmente uma Filosofia da Física (SCERRI & MCINTYRE, 1997). Segundo Schummer (2006; ABRANTES, 2011), tal movimento em busca de autonomia da Filosofia da Biologia começou a ocorrer em meados da década de 1970, e, atualmente, essa disciplina se encontra em estado de maturidade. Abrantes (2011) indica alguns problemas conceituais que atualmente têm sido discutidos no âmbito da Filosofia da Biologia: função biológica; taxonomia e espécie biológica; pensamento tipológico e pensamento populacional; adaptacionismo; níveis e unidades de seleção; e seleção natural.

Uma análise dos trabalhos dos filósofos da ciência do século XX, principalmente os provenientes da tradição anglo-saxã, revela que os mesmos praticamente ignoraram os problemas filosóficos da Química (LABARCA, 2010). Segundo Labarca (2010), desde o positivismo lógico, passando depois por filósofos da ciência como Karl Popper (1902-1994), Thomas Kuhn (1922-1996), Imre Lakatos (1922-1974) e Paul Feyerabend (1924-1994), a Física foi considerada a ciência modelo na Filosofia da Ciência. Para Labarca (2010), isso é surpreendente, dada a extensa e rica História da Química⁷ como disciplina científica.

Para Labarca (2010) e Schummer (2006), as causas que atenuaram o interesse em questões filosóficas da Química são variadas, e, portanto, apenas algumas serão descritas aqui.

⁶ Scerri e McIntyre (1997) esclarecem que é possível encontrar uma pequena literatura com algum problema filosófico especial em química, mas que, proporcionalmente à filosofia da biologia e, principalmente, à filosofia da física, a quantidade de trabalhos é muito reduzida. Podemos citar, por exemplo, Gaston Bachelard (1884-1962) e o seu *Pluralismo Coerente da Química Moderna* (Bachelard, 2009), cuja primeira edição data de 1932, como um dos poucos filósofos a investigar filosoficamente a Química no século XX.

⁷ É interessante ressaltar que os termos *Filosofia da Química* ou *filosofia química* eram frequentemente utilizados nos títulos de livros e tratados do século XVII ao século XIX (SCERRI, 1999), ainda que com significado diferente do considerado atualmente.

1.3. Justificativas para que as investigações filosóficas da Química tenham sido negligenciadas

1.3.1. Contexto de formação dos filósofos no século XIX

Segundo Schummer (2006), uma das causas pode ser atribuída à própria história da Filosofia. Ainda na virada para o século XIX, o termo *filosofia* era utilizado para designar uma ampla variedade de ciências e artes presentes nas faculdades filosóficas, incluindo as artes Matemáticas. Essa relação com as matemáticas fez com que muitos filósofos ensinassem matemáticas, incluindo as matemáticas aplicadas, tais como a óptica geométrica e a mecânica, sendo que essas viriam a ser incorporadas pela Física Moderna em meados do século XIX. Por outro lado, outras ciências naturais, como a Química e a Biologia, eram principalmente ensinadas em faculdades de medicina, de modo que permaneceram afastadas dos filósofos até hoje.

1.3.2. Ideal kantiano de ciência

Schummer (2006) acrescenta que o ideal de ciência fundado na epistemologia e metafísica das ciências Matemáticas, proposto por Kant no século XVIII, teve grande influência sobre os filósofos, e, conseqüentemente, na escolha dos tópicos estudados pela Filosofia durante os séculos XIX e XX. O ideal kantiano de ciência fez com que as demais ciências, que não apresentassem uma fundação *a priori* nas Matemáticas, caso das outras ciências experimentais, como a Química e a Biologia, fossem ignoradas⁸.

1.3.3. Campanhas anti-químicas e ausência de crises na disciplina de Química

Outros fatores contribuíram para atenuar o desenvolvimento da Filosofia da Química, tais como: as campanhas anti-científicas, especialmente as anti-químicas, nos meios de comunicação (VANCİK, 1999; LABARCA, 2010); e a ausência de crises nas ciências Químicas, que marquem o curso de sua evolução (LABARCA, 2010). No primeiro caso, Vancik (1999) expressa que, “os problemas ecológicos do mundo contemporâneo são atribuídos à influência destrutiva da Química” (VANCİK, 1999, p. 243), de modo a não favorecer a imagem da Química na sociedade. No segundo caso, Labarca (2010) cita como

⁸ Segundo Schummer (2006), não apenas a Química foi negligenciada pelos filósofos da ciência, mas, também, todos os outros ramos das ciências naturais, incluindo, até recentemente, a Física experimental.

exemplos as crises que ocorreram na Física no final do século XIX e começo do século XX, desencadeadas pela Mecânica Quântica e a teoria da relatividade. Tais crises proporcionaram profundas reflexões filosóficas, com diferentes visões⁹ sobre questões físicas.

Ainda que tenha se tornado célebre a interpretação de Thomas Kuhn, expressa na obra *A estrutura das revoluções científicas*, a respeito da ocorrência de uma *revolução química* desencadeada por Lavoisier e colaboradores no século XVIII, historiadores da Química das últimas décadas têm questionado a adequação desse modelo para essa disciplina. Debus (1991) argumenta que a revolução química se estendeu por dois séculos e meio, do século XVI ao XVIII, apresentando diferentes etapas, de maneira que os trabalhos de Lavoisier e seus colaboradores são partes constituintes de um panorama mais amplo. Dessa forma, Debus (1991) concebe que a revolução química, no período referido, ocorreu de maneira lenta e gradativa, não sendo possível identificar um período de *crise*, tal como o descrito por Kuhn (2009), no âmbito da química.

1.3.4. Visão reducionista da Química em relação à Física

Para Labarca (2010), outra causa para o pouco interesse na Filosofia da Química pode ser atribuída à Mecânica Quântica e suas consequências para as relações entre Física e Química. Os êxitos obtidos pela Mecânica Quântica durante o século XX levaram alguns físicos e filósofos da ciência a aceitarem que a Química poderia ser completamente reduzida¹⁰ à Física. Tal prognóstico fica evidente na seguinte afirmação de Paul Dirac, um dos grandes nomes da Mecânica Quântica:

As leis físicas fundamentais necessárias para a teoria matemática de grande parte da Física e a totalidade da Química são, assim, completamente conhecidas, e a única dificuldade é que a aplicação exata dessas leis leva a equações muito complicadas para serem resolvidas. Por consequência, torna-se desejável que métodos práticos aproximados de aplicação da Mecânica Quântica sejam desenvolvidos, que podem levar a uma explicação das principais características dos sistemas atômicos complexos sem muitos cálculos. (DIRAC, 1929, p. 714)

⁹ Na década de 1920, a discussão sobre os fundamentos da Mecânica Quântica levou à formação de dois grupos com posições físicas e filosóficas bem distintas. De um lado, os seguidores da *Interpretação de Copenhagen*, defendida por Bohr, Heisenberg, Dirac, Born e Pauli, e, de outro, os adeptos de *interpretações realistas*, defendidas por Einstein, Schrödinger e de Broglie (CHIBENI, 1992).

¹⁰ Para ilustrar isso, Lombardi e Labarca (2005) indicam que, para os reducionistas, a Física é a “ciência ‘fundamental’, que descreve a realidade em seus aspectos profundos, enquanto que a Química é considerada como uma ciência meramente ‘fenomenológica’, descrevendo os fenômenos unicamente como eles aparecem para nós” (LOMBARDI & LABARCA, 2005, p. 126). A distinção entre Química e Física, segundo Lombardi e Labarca (2005), está de acordo com a hierarquia tradicional das ciências naturais descrita pelo pensamento positivista do século XIX, ou seja, a Física como mais fundamental do que a Química.

Lombardi e Labarca (2005) afirmam que a visão reducionista proposta por Dirac (1929) considera a Química como uma subdisciplina da Física, na medida em que trata de “sistemas complexos ou processos particulares que, no entanto, poderiam ‘em princípio’ ser descritos e explicados por meio da Mecânica Quântica” (LOMBARDI & LABARCA, 2005, p. 126). Segundo Lombardi e Labarca, tal visão foi amplamente difundida entre físicos e filósofos da ciência. Essa ampla aceitação do reducionismo durante o século XX desencadeou, na Filosofia da Ciência, a compreensão, ainda que implicitamente, de que a Filosofia da Química poderia ser perfeitamente reduzida à Filosofia da Física, ou seja, qualquer eventual problema filosófico da Química poderia ser explicado no âmbito da Filosofia da Física (SCERRI & MCINTYRE, 1997).

Embora vários fatores tenham sido apontados para explicar o tardio desenvolvimento da Filosofia da Química, sendo que apenas alguns foram citados aqui, nos parece que a visão reducionista, amplamente difundida no século XX, tenha exercido influência importante nesse processo.

1.4. *Pela autonomia da disciplina de Filosofia da Química*

1.4.1. Argumentos contra o reducionismo da Química em relação à Física

Segundo Lombardi e Labarca (2005), de maneira geral, os argumentos apresentados a favor da autonomia da Química apontam para o fracasso da redução epistemológica, isto é, “nem todos os conceitos e leis químicas podem ser derivados da física” (LOMBARDI; LABARCA, 2005, p.126). Esses autores descrevem que muitas noções químicas relevantes, tais como ligação química, quiralidade, estrutura molecular e orbitais, entre outros, “não são passíveis de um tratamento mecânico quântico rigoroso” (LOMBARDI & LABARCA, 2005, p.127). Por exemplo, Primas (1983, *apud* SCERRI & MCINTYRE, 2006) afirma que o conceito de ligação não é redutível à Mecânica Quântica, pois é possível calcular energias de ligação sem conhecer o que é uma ligação. Do mesmo modo, Woolley (1978) apresenta argumentos para a impossibilidade de se deduzir o conceito de estrutura molecular a partir da Mecânica Quântica. Pode-se acrescentar a afirmação de Schummer (2006) de que, em certos campos de pesquisa, “a abordagem mecânico-quântica é pobre, ou mesmo inútil, quando comparada com outras abordagens”, enquanto que em outros campos é “forte e mesmo indispensável” (SCHUMMER, 2006, p. 27).

Como ressalta Schummer (2006), o reducionismo é um importante tópico na Filosofia da Química. Os debates sobre o reducionismo têm uma longa história dentro da Filosofia da

Ciência, e se desenvolvem ainda hoje (SCERRI & MCINTYRE, 1997). Uma discussão que se arrasta há tanto tempo pode ser explicada pela complexidade da questão, pois o reducionismo se apresenta de diversas formas e níveis.

O reducionismo epistemológico, citado anteriormente, se refere à dependência lógica entre as teorias científicas, de modo que uma teoria (teoria A) poderia em princípio reduzir-se a outra teoria (teoria B), desde que pudesse ser deduzida a partir da teoria redutora (teoria B) (LABARCA, 2006). Entre os filósofos da Química há um consenso da impossibilidade de se reduzir epistemologicamente a Química à Física (SCERRI & MCINTYRE, 1997; LOMBARDI & LABARCA, 2005; VIHALEMM, 2010).

O reducionismo ontológico, por sua vez, se refere à posição filosófica de que apenas uma realidade é possível, possuindo existência real e objetiva, enquanto os demais níveis têm uma existência meramente subjetiva ou aparente (LABARCA, 2006). A redução ontológica é um dos tipos de redução mais discutidos atualmente dentro da Filosofia da Química. Para citar dois trabalhos com posicionamentos distintos frente a essa questão, citamos o trabalho de Lombardi e Labarca (2005), que defendem a impossibilidade da redução ontológica e propõem um pluralismo ontológico, e o trabalho de Scerri e McIntyre (1997) em que “a dependência ontológica da Química em relação à Física é quase uma conclusão inevitável”¹¹ (*ibid.*, p. 215).

Scerri e McIntyre (1997) indicam ainda duas outras formas de redução, que podem ser consideradas reduções epistemológicas, a saber, a redução quantitativa e a redução conceitual. A primeira diz respeito ao cálculo de propriedades químicas, tais como, energia de uma molécula e momento de dipolo, a partir de teorias físicas, particularmente a Mecânica Quântica. De acordo com a segunda, conceitos químicos, tais como ligação química e estrutura molecular, podem ser expressos em termos físicos. Segundo Scerri e McIntyre (1997), tanto o reducionismo quantitativo quanto o reducionismo conceitual são, em alguma medida, impossíveis.

1.4.2. A necessidade de aproximações sinérgicas entre Filosofia e Química

A relativa pouca atenção recebida dada à Filosofia da Química contrasta com o papel de destaque atribuído à Química no âmbito das ciências naturais (SCERRI & MCINTYRE,

¹¹ Para evidenciar a complexidade dessa questão, o próprio Scerri modificou a sua concepção em trabalhos posteriores, colocando-se entre o realismo e a redução ontológica. Nesse novo posicionamento, Scerri (2000a) defende que o nível ontológico é dependente de cada ciência, e mesmo de cada teoria. Há, ainda, reducionistas ontológicos e, portanto, críticos do pluralismo ontológico de Labarca e Lombardi (2005), como, por exemplo, Needham (2006), Vihalemm (2010) e Manafu (2013), que adotam essa posição, principalmente, por considerarem que, atualmente, não há propostas satisfatórias para esse problema.

1997). Para estimar o grau de importância da Química frente às outras ciências, Schummer (2006) fez um levantamento do número de novas publicações (livros, artigos, patentes, etc.) anuais em várias ciências, considerando que a quantidade de publicações fornece uma boa estimativa do tamanho de uma disciplina científica. Esse levantamento revela que o número de publicações da Química contemporânea é de aproximadamente 1 milhão por ano, em sua maioria tratando da síntese de novas substâncias. Schummer conclui que “a Química não só é a maior disciplina, mas, também, é maior do que o total de todas as outras ciências naturais somadas, incluindo todas as suas recentes tecnologias relacionadas” (SCHUMMER, 2006, p. 19).

Por outro lado, como apontam Scerri e McIntyre (1997), a Química tem sido, e continua a ser, uma ciência preocupada com questões filosóficas tradicionais, como a natureza dos elementos, das substâncias, e, portanto, preocupada, em última análise, com a natureza da matéria. Como consequência, no final da década de 1980 e começo da década de 1990, químicos, filósofos e historiadores da Química começaram a defender a Filosofia da Química como um âmbito legítimo de investigação filosófica (LABARCA, 2010; SCHUMMER, 2006). Esses autores começaram a desafiar as suposições tradicionais¹² no sentido de restabelecer a autonomia da Química, e, por consequência, a legitimidade da Filosofia da Química.

Além disso, no âmbito social, Schummer (2006) expressa que essa aproximação entre Química e Filosofia (humanidades) também foi motivada por questões relacionadas às aplicações da Química, no sentido de melhorar a péssima imagem da Química, generalizada na sociedade, tal como indicado por Vancik (1999).

Vale destacar que a *autonomia da Química*, mencionada por diversos filósofos da Química, diz respeito, na nossa compreensão, à necessidade de se constatar que há problemas filosóficos próprios da Química que não são redutíveis à Filosofia da Física e, além disso, de que tais problemas devem ser refletidos *pela* própria Química e *por meio* dessa. Tal postura se caracteriza por propor respostas às questões “O que é Química?” e “Como ela funciona?”. Obviamente, esses autores não rejeitam as contribuições das outras áreas do conhecimento para compreender o que é a Química e como ela funciona, como, por exemplo, a História da Ciência e a Filosofia da Ciência, mas, diferentemente do que ocorreu durante o século XX, essas não são tomadas isoladamente para se compreender a disciplina de Química.

¹² Para indicar um desses grupos, cita-se o caso dos químicos teóricos do final da década de 1970, responsáveis pelo desenvolvimento de modelos químico-quânticos, que começaram a contestar a visão reducionista (SCHUMMER, 2006).

1.4.3. Perspectivas de pesquisa em Filosofia da Química

A aproximação entre Química e Filosofia deve ser acompanhada, como indica Schummer (2006), por uma compreensão profunda da História da Química, pois é através dessa última, em conjunção com a Filosofia da Química, que podemos inferir as particularidades da disciplina atualmente (âmbito interno da disciplina), bem como as particularidades existentes quando comparamos a Química com outras disciplinas científicas (relação com outras disciplinas).

Diante disso, a História e a Filosofia da Química têm produzido reflexões sobre conceitos fundamentais na Química¹³, como, por exemplo: substância simples, composto (substância composta), afinidade, reação química, átomo, estrutura molecular e aromaticidade (SCHUMMER, 2006). Além disso, a Filosofia da Química tem analisado os métodos químicos, que podem ser divididos em: i) métodos práticos, tais como experimentação, instrumentação e síntese química; e ii) métodos cognitivos, tais como a linguagem pictórica da Química e inúmeras formas de construção de modelos e representação (*ibid.*). Este último tópico de investigação da Filosofia da Química será discutido com maior profundidade no **Capítulo 4 – Semiótica Química**, dada sua importância para esta dissertação.

Além desses tópicos, Scerri e McIntyre (1997) indicam outros tópicos de investigação para a Filosofia da Química, tais como a natureza da explicação química, as leis químicas e a noção de superveniência, que indica as relações entre entidades macroscópicas e microscópicas.

A Filosofia da Química pode contribuir não só para a ciência Química, mas, também, para compreensão filosófica das demais ciências a partir de uma perspectiva química¹⁴, respeitando a autonomia das demais, pois, como salienta Schummer (2006), a Filosofia da Química pode tratar de tópicos como:

[...] os conceitos de experimento, leis, modelos, previsão e explicação; [...] as abordagens científicas para a classificação e construção de conceitos e modelos; o tratamento de teorias rivais; métodos de pesquisa no sentido de explorar o novo; o papel dos instrumentos na pesquisa; a distinção e a relação entre ciência e tecnologia. (SCHUMMER, 2006, pg. 27-28)

Por se tratar de uma disciplina em fase inicial de desenvolvimento, novas questões filosóficas poderão surgir conforme novas particularidades da Química sejam identificadas. No sentido de indicar futuras pesquisas em Filosofia da Química, Schummer (2006)

¹³ Schummer (2006) apresenta uma lista de trabalhos em Filosofia da Química que discorrem sobre conceitos fundamentais da química e métodos químicos.

¹⁴ Além de outras ciências, Scerri e McIntyre (1997) indicam que a Filosofia da Química pode contribuir para os debates dentro da Filosofia da Mente e da Filosofia da Ciência social.

apresenta alguns ramos da Filosofia que estão relacionadas com particularidades da Química: i) Lógica; ii) Ontologia; iii) Filosofia da Natureza; iv) Filosofia da Literatura; v) Ética; e vi) Estética.¹⁵ A lógica filosófica visa estudar a estrutura conceitual utilizada na representação e reflexão sobre o mundo, e a Química, como indica Schummer (2006), apresenta uma estrutura conceitual que está construída sobre um tipo peculiar de relações. As questões ontológicas surgem quando as estruturas conceituais são usadas para enquadrar o mundo, e a Química apresenta noções muito abstratas que necessitam ser investigadas sob um referencial ontológico, tais como, “entidade química, identidade de espécies, similaridade, membros de mesma classe, distinção, e hierarquia” (ibid., p. 32). Questões filosóficas emergem quando consideramos que as ciências naturais têm como objeto de estudo a Natureza. Nesse contexto, a química, devido à produção de substâncias inexistentes na Natureza, gera o par *natural x químico (artificial)*, entendido de diferentes formas por químicos e não químicos. A Filosofia da Literatura diz respeito à imagem pública da ciência e dos cientistas, abrangendo questões que envolvem a distância da Química em relação à sociedade, bem como a péssima imagem da Química no âmbito do senso comum. Em relação às questões éticas, Schummer (2006) indica que tais questões são, em grande parte, negligenciadas na Química. Isso é surpreendente, pois questões ambientais, farmacológicas e a pesquisa de armas químicas estão intrinsecamente relacionadas com a Química. Por fim, as questões estéticas emergem quando constatamos que a Química faz uso de todo tipo de meios de visualização, visando representar a *realidade* através de modelos.

Diante da multiplicidade de tópicos sendo investigados pela Filosofia da Química, esta dissertação visa contribuir para reflexões sobre os tópicos de *realismo científico* e *representações*, tanto do ponto de vista filosófico quanto educacional. Nesse sentido, serão expostas a seguir algumas implicações da Filosofia da Química para o Ensino de Química.

1.5. Um novo olhar sobre o Ensino de Química

Na seção anterior, ressaltamos a importância da Filosofia da Química para uma compreensão epistemológica da ciência Química, e também como fonte de conclusões passíveis de alimentarem outros debates dentro da Filosofia da Ciência. Entretanto, além desses campos, os trabalhos de Scerri (2000b), Erduran (2001), Labarca (2006), e Lombardi e Labarca (2007), apresentam implicações da Filosofia da Química para o Ensino de Química.

¹⁵ A maioria desses tópicos, se não todos, já apresentam trabalhos publicados. Contudo, as discussões estão longe de estarem esgotadas no âmbito da filosofia da química, como é o caso da questão ontológica.

Para Labarca (2006), a importância da Filosofia da Química no Ensino de Química é o de possibilitar uma melhor compreensão da natureza da Química, bem como o de identificar o lugar da Química no contexto das ciências naturais, principalmente em relação à Física, e o problema que emerge ao considerar aquela redutível a esta. Além disso, Labarca (2006) acrescenta que “as questões filosóficas relacionadas com a epistemologia e a ontologia são essenciais para compreender em profundidade a disciplina [Química]” (*ibid.*, p. 68).

A questão da redução da Química à Física, segundo Scerri (2000b), teve um grande impacto no Ensino de Química. Para esse autor, constata-se isso pelo uso cada vez maior de princípios físicos, principalmente a Mecânica Quântica, para explicar, por exemplo, a estrutura atômica e a tabela periódica. Essa perspectiva tem negligenciado, em grande parte, “os aspectos qualitativos e a diversidade de fenômenos observados” (SCERRI, 2000b, p. 522). Para Scerri (2000b), os educadores químicos devem “manter um equilíbrio entre princípios unificadores e os aspectos aparentemente mais descritivos e qualitativos”¹⁶ (*ibid.*, p. 522). Tal posicionamento deve ocorrer não só na prática docente dos educadores químicos, mas, também, nos livros didáticos – objetos desta pesquisa e que serão discutidos posteriormente.

Segundo Lombardi e Labarca (2007), o problema da redução e, por consequência, da autonomia da Química, evidencia “a necessidade de se introduzir argumentos filosóficos como um novo recurso pedagógico no Ensino de Química” (*ibid.*, p. 387), para que, dessa forma, os educadores químicos possam se posicionar sobre essas questões e, posteriormente, levar essas questões às salas de aula de química, privilegiando a exposição de diferentes argumentos. Através da discussão de diferentes perspectivas, os estudantes de química seriam conduzidos a construir conscientemente suas compreensões sobre a natureza da Química e sua relação com as demais ciências.

A aproximação entre Filosofia da Química e Ensino de Química permite que os educadores químicos discutam o significado de termos como, por exemplo, modelos (SCERRI, 2000b; LABARCA, 2006) e leis químicas (SCERRI, 2000b).

Como ressalta Labarca (2006), “a construção de modelos é uma atividade central na prática científica da Química” (LABARCA, 2006, p. 63), acrescentando que uma teoria científica não faz referência direta à realidade, mas a um modelo científico que é uma idealização de uma realidade complexa. Outras questões emergem da utilização de modelos científicos, pois, como indica Scerri (2000b), muitas vezes os educadores químicos

¹⁶ Essa questão se deve à natureza da ciência Química e ao aparente paradoxo filosófico em que *muitos* e *um* podem coexistir (SCERRI, 1999), sendo que o *um* (que podemos entender como *poucos*), se refere aos princípios unificadores, e os *muitos*, à imensa diversidade de substâncias e fenômenos observados na Química.

identificam a frustração dos alunos quando diferentes explicações químicas são apresentadas para um mesmo fenômeno, caracterizando a crença entre os alunos de que exista a explicação fundamental. A aproximação entre Filosofia da Química e Ensino de Química possibilita a compreensão de que diferentes modelos químicos para um mesmo fenômeno podem ter o mesmo grau de genuinidade, conforme o contexto aplicado¹⁷ (LABARCA, 2006)

Segundo Scerri (2000b), as leis químicas são uma das particularidades dessa ciência, pois não são idênticas às leis do movimento de Newton ou outras leis da física. Um exemplo seria a lei periódica dos elementos, na qual “a ocorrência periódica dos elementos, depois de certo intervalo, é apenas aproximada” (SCERRI, 2000b, p. 523). Essa distinção sugere que as leis da Natureza podem diferir entre uma disciplina científica e outra. A apresentação das particularidades da lei periódica se faz necessária pela onipresença do sistema periódico no Ensino de Química, bem como na pesquisa Química (SCERRI, 2000b).

Outro ponto discutido na Filosofia da Química e, de modo geral, na Filosofia da Ciência, com implicações para o Ensino de Química, é o realismo científico. Este ponto será discutido com maiores detalhes no próximo capítulo, visando fornecer subsídios para a análise do estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais nos livros didáticos de Química Geral.

¹⁷ Labarca (2006) esclarece que “não há um único modelo para um sistema [...]. Desse modo, não podemos considerar que um modelo seja ‘melhor’ do que outro em sentido absoluto, mas apenas em relação à perspectiva de investigação” (LABARCA, 2006, p. 62).

CAPÍTULO 2 – O ESTATUTO ONTOLÓGICO E EPISTEMOLÓGICO DO ORBITAL NA LITERATURA

Neste capítulo apresentaremos diferentes perspectivas em relação ao estatuto *ontológico* e *epistemológico* do conceito de orbital que têm sido relatadas na literatura. Uma discussão ontológica diz respeito ao ser, ao que existe ou não existe no mundo, ou à natureza do mundo (PESSOA JR., 2009); uma discussão epistemológica se refere à discussão do conhecimento, à sua possibilidade ou natureza de um dado conhecimento (PESSOA JR., 2009). Para exemplificar isso, no âmbito desta pesquisa, uma discussão ontológica compreenderia a afirmação da existência ou não dos orbitais. Tendo afirmado que tal conceito se refira a uma entidade na natureza, uma discussão epistemológica abrangeria, por exemplo, a possibilidade ou não de observá-lo.

Tais discussões abarcam não somente considerações quanto à realidade ou não do conceito de orbital (estatuto ontológico) e a possibilidade de observá-los ou não (estatuto epistemológico), mas, também, a natureza desse conceito, tal como seus limites e possibilidades de aplicação – considerações de cunho epistemológico.

Foram identificados na literatura dois momentos em que os estatutos ontológico e epistemológico dos orbitais foram colocados em discussão. O primeiro momento se refere a um breve debate ocorrido no início da década de 1990 no periódico *Journal of Chemical Education*, iniciado a partir da publicação de um artigo rejeitando categoricamente a existência dos orbitais.

O segundo momento se refere aos debates que se iniciaram na literatura de Filosofia da Química e, também, em alguns periódicos dedicados à pesquisa em Química e Filosofia da Física, após a publicação do trabalho de Zuo e colaboradores (1999) na revista *Nature*, corroborado sem maiores ressalvas pelo editorial desse periódico, em que se afirmou que *orbitais haviam sido observados diretamente*. Ainda hoje, trabalhos que tomam esse artigo como ponto de partida têm sido publicados, visando discutir a questão da existência dos orbitais e a possibilidade de observá-los. Isso mostra a atualidade de tais debates e a fecundidade de questões que dele emergem. Além disso, desde a publicação de Zuo e colaboradores (1999), outros trabalhos têm relatado a observação de orbitais. Assim, as críticas filosóficas a esses últimos, ainda que em menor número, também foram compiladas nesse segundo momento.

As discussões ontológicas e epistemológicas envolvendo o conceito de orbital relacionam-se a um debate mais amplo, entre realistas científicos, de um lado, e antirrealistas científicos, do outro, que delineamos brevemente a seguir.

2.1. Realismo científico x antirrealismo científico: diferentes perspectivas sobre a relação entre teorias e realidade

A realidade ou não das entidades explicativas empregadas pelas teorias científicas, bem como se as teorias científicas descrevem o mundo como ele é, é discutida no âmbito da Filosofia da Ciência no tópico denominado *realismo científico*, que se constitui “como um conjunto integrado e híbrido de teses filosóficas a respeito de diferentes aspectos ou dimensões da ciência” (*ibid.*, p. 8). Chibeni (1996) considera que o realismo científico é “uma tese sobre o problema epistemológico dos limites do conhecimento” (*ibid.*, p.48).

2.1.1. Teses gerais defendidas por um realista científico

O realismo científico se apresenta de variadas formas (PLASTINO, 1995). Por exemplo, Ian Hacking (1983 *apud* DUTRA, 1996) distingue duas formas de realismo científico: o realismo sobre as teorias, o qual defende que as teorias são verdadeiras (ou aproximadamente verdadeiras); e o realismo sobre as entidades, que defende a existência das entidades inobserváveis que correspondem aos termos teóricos.

Embora algumas proposições realistas possam ser antagônicas para diferentes filósofos, as seguintes proposições são, de maneira geral, encontradas em visões realistas da ciência:

- i) A existência e a natureza dos fatos do mundo não dependem das teorias ou métodos que a ciência utiliza; ii) toda asserção científica, interpretada literalmente, é ou verdadeira ou falsa; iii) O valor-de-verdade de uma asserção científica é determinado pelo mundo. Uma asserção é verdadeira quando mantém uma relação de correspondência com o mundo; iv) A ciência procura teorias que façam uma descrição verdadeira (ou aproximadamente verdadeira) do mundo; v) Os termos teóricos preservam sua referência durante as mudanças científicas. As teorias científicas sucessoras incorporam o cerne das teorias precedentes; vi) O progresso da ciência consiste num processo convergente de aproximação de uma teoria científica completa e verdadeira; vii) Nas ciências maduras, as teorias são aproximadamente verdadeiras e seus termos centrais referem-se a objetos do mundo. (PLASTINO, 1995, p. 9)

Como esclarece Silva (1998), o mundo descrito por uma certa proposição não se restringe apenas a entidades observáveis, abrangendo também entidades inobserváveis. No realismo científico, as entidades (observáveis ou não) que constituem a realidade são independentes da teoria científica, à qual cumpre desvelar tais entidades. Diante disso, na visão realista, os termos teóricos fazem referência a entidades inobserváveis, que são existentes. Podemos ilustrar isso se considerarmos que os termos teóricos da mecânica

newtoniana, tais como força, inércia e gravidade, não são apenas constructos mentais, mas referem-se a entidades realmente existentes, “pois revelam a estrutura causal do mundo, e permitem uma explicação em torno destes mecanismos causais” (*ibid.*, p. 8).

2.1.2. Teses gerais defendidas por antirrealistas científicos

As posições filosóficas antagônicas ao realismo são chamadas de antirrealismo científico¹⁸, de acordo com o qual as “hipóteses acerca do mundo são apenas construções mentais, que se impõem não por seu caráter referencial, mas em função de sua capacidade explicativa” (SILVA, 1998, p. 8). Desse modo, enquanto no realismo científico considera-se que as leis científicas são descobertas, no antirrealismo considera-se que as mesmas são inventadas (VAN FRAASSEN, 1989 *apud* SILVA, 1998). Como indica Plastino (1997), a concepção da verdade como correspondência é uma das teses do realismo científico. No antirrealismo científico essa tese é criticada, e em algumas formulações radicais é abandonada completamente. Para o antirrealista, “a finalidade das teorias não é a verdade, mas apenas uma acomodação das nossas crenças a algum quadro teórico aceitável, de modo que elas possuam alguma utilidade epistêmica” (SILVA, 1998, p. 8).

2.1.3. Argumentos em favor do antirrealismo científico

Silva (1998) apresenta outros dois argumentos contra o realismo científico. O argumento ontológico se refere “à possibilidade de acesso epistêmico ao mundo” (*ibid.*, p.9), isto é, às limitações intrínsecas, tais como os sentidos, que temos ao conhecer o objeto. Os dados sensíveis, provenientes da nossa percepção do objeto, revelam apenas os fenômenos observáveis (cor, forma, cheiro), enquanto que a suposta estrutura subjacente do mundo (inobservável) não nos é revelada. O argumento metodológico se refere à “tese da subdeterminação das teorias pelos dados” (SILVA, 1998, p. 9). Segundo essa tese, uma mesma evidência empírica pode corroborar duas teorias logicamente distintas e, por consequência, o mundo externo não pode ser tomado como o padrão para a avaliação de diferentes teorias, tal como indicam os realistas. A escolha entre teorias rivais, segundo van Fraassen (1980 *apud* CHIBENI, 1996), seria feita através de princípios não-empíricos, como, por exemplo, o poder explicativo e a simplicidade, e que não dizem respeito às relações entre teoria e o mundo, mas aos usuários da teoria.

¹⁸ Do mesmo modo que o realismo, o antirrealismo apresenta diferentes formulações, que vão desde uma versão radical que abandona a concepção clássica de verdade, até versões que retêm a concepção de verdade como correspondência (CHIBENI, 1996).

2.1.4. Argumentos em favor do realismo científico

O antirrealismo também apresenta pontos passíveis de críticas, não sendo capaz de explicar certas características da ciência que são explicadas satisfatoriamente pelo realismo científico. O antirrealismo científico não consegue tratar com plausibilidade, por exemplo, a questão do poder explicativo e preditivo de uma teoria científica. Como expressa Plastino (1995), o realista argumenta que “a ciência é bem sucedida em suas conclusões empíricas exatamente porque suas melhores teorias são aproximadamente verdadeiras (ou suas normas metodológicas são confiáveis na busca da verdade)” (*ibid.*, p. 16). Plastino (1995) ilustra a complexidade desse debate apontando que “o realista não é capaz de mostrar que o poder explicativo do realismo garante a crença na verdade (aproximada) da teoria ou na existência das entidades que ela postula” (*ibid.*, p. 17).

Outro ponto de crítica dirigido aos antirrealistas se refere ao argumento da subdeterminação das teorias, que “não leva em conta o avanço da ciência, uma vez que as evidências empíricas podem variar de acordo com o progresso das teorias” (SILVA, 1998, p. 10). Assim, o realista estaria em melhor situação do que o antirrealista. Mas essa posição de conforto do realista é rapidamente abalada, pois o realismo não explica como certas teorias científicas alcançaram considerável êxito instrumental e foram abandonadas posteriormente em prol de outras teorias (PLASTINO, 1995).

Através desses poucos exemplos, procuramos destacar que não existe um consenso sobre essas questões no âmbito da Filosofia da Ciência. Além disso, as questões envolvendo o realismo científico permeiam a Química, bem como o Ensino de Química, como veremos na próxima seção.

2.1.5. As implicações do realismo científico para a Química e para o Ensino de Química

As questões envolvendo o realismo científico também têm sido discutidas no âmbito da Filosofia da Química (SCERRI, 2000b). Segundo Scerri (2000b), os químicos têm uma tendência a serem realistas ingênuos, sendo esse posicionamento apropriado para alguns casos, e inadequado para outros. Seria adequado, por exemplo, para identificar propriedades secundárias das substâncias, tais como a cor, que é útil na identificação preliminar de muitos compostos químicos (*ibid.*). Por outro lado, seria inadequado ao tomar um modelo aproximado como uma descrição fiel da realidade, como, por exemplo, a configuração eletrônica (SCERRI, 2000c) ou a estrutura molecular (WOOLLEY, 1978).

2.1.5.1. O exemplo da configuração eletrônica

Muitos livros didáticos, bem como educadores em Química, argumentam que o orbital 4s é preferencialmente ocupado porque tem menor energia que o orbital 3d (SCERRI, 2000b). Contudo, os trabalhos de Melrose e Scerri (1996) e Vanquickenborne, Pierloot e Devoghel (1994) afirmam que o orbital 4s nunca tem energia menor do que o 3d. O problema da energia do orbital é proveniente da aproximação da teoria mecânico-quântica de átomos hidrogenoides para átomos polieletrônicos, em que se negligenciam as repulsões intereletrônicas presentes nesses últimos. Diante disso, a ordenação de níveis de energia em átomos polieletrônicos comumente apontada por livros didáticos e educadores em Química não é, de fato, uma descrição fiel (ou mais fiel) da realidade. Esse caso não só ilustra uma postura realista inadequada, mas, também, um desconhecimento sobre a natureza dos modelos científicos – seus limites e possibilidades.

2.1.5.2. O exemplo da estrutura molecular

Outro conceito químico cujo estatuto ontológico foi questionado é a estrutura molecular, que se refere ao arranjo espacial dos átomos em uma molécula. Por exemplo, o Ensino de Química comumente faz uso de modelos moleculares do tipo bola e bastão, em que as bolas representam os átomos na molécula e os bastões, a ligação entre esses átomos. Essa representação transmite a ideia, dentre outras, de que os átomos, ou mais precisamente, os núcleos dos átomos, estão em repouso na molécula.

Segundo Woolley (1978), o conceito de estrutura molecular, que é central na Química e no Ensino de Química, pois se relaciona à compreensão das propriedades físico-químicas da matéria, é apenas uma metáfora sem realidade objetiva. Como esclarece Scerri (2000b), o hamiltoniano utilizado em cálculos na Mecânica Quântica, para uma molécula qualquer, só contém termos que descrevem as interações entre prótons e elétrons do sistema. Com o intuito de simplificar os cálculos, utiliza-se a aproximação de Born-Oppenheimer, na qual se supõe que apenas os elétrons se movem na molécula, enquanto os núcleos, devido à maior inércia¹⁹, mantêm-se em repouso. A descrição mecânico-quântica pura, sem a utilização da aproximação de Born-Oppenheimer, como aponta Woolley (1978), não atribui qualquer estrutura para as moléculas, e, não obstante, produz previsões mais precisas.

¹⁹ No átomo mais simples, o ^1H , o núcleo atômico tem massa aproximadamente 1836 vezes maior que a do elétron.

O trabalho de Woolley (1978) gerou incredulidade na maioria dos químicos, possivelmente devido à grande familiaridade e enraizamento deste conceito na visão química, a ponto de se atribuir caráter de realidade à estrutura molecular. Como indica Woolley (1978), o conceito de estrutura molecular é “o dogma central da ciência molecular” (*ibid.*, 1074).

Outro conceito químico que tem levantado discussões sobre a sua referência ou não à realidade é o conceito de orbital. Este é o objeto a ser investigado nesta dissertação, no que tange a sua face didática; assim, as questões realistas que envolvem esse conceito serão tratadas com mais detalhes na próxima seção.

2.2. Não existem coisas tais como orbitais – os debates no Journal of Chemical Education

2.2.1. Um consenso quanto à não existência do orbitais

A controvérsia sobre o estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais apresentou seus primeiros debates na literatura no início da década de 1990, inicialmente no periódico *Journal of Chemical Education*. Dentre os participantes, ressalta-se a presença ilustre de Linus Pauling (1901-1994), prêmio Nobel em Química e um dos fundadores da disciplina Química Quântica.

Essa controvérsia teve início com a publicação do artigo *The Nature of the Chemical Bond – 1990: There are no such things as orbitals!* (OGILVIE, 1990, destaque do autor). Ogilvie declara que, nas últimas décadas, uma diversidade de fenômenos físicos e químicos têm sido explicados por meio do conceito de orbital, como, por exemplo, a estabilidade de compostos de transição em termos da *doação- π* ou da *retrodoação* em orbitais d. O uso corriqueiro e não problemático de tais termos pelos químicos sugere que orbitais existem.

Todavia, na compreensão desse autor, um orbital “é precisamente uma função matemática, especificamente uma solução da equação de Schrödinger para um sistema monoelétrônico” (OGILVIE, 1990, p. 282). Segundo Ogilvie (1990), essa compreensão é tributária dos trabalhos de Robert Mulliken (1896-1986), criador da teoria de orbitais moleculares (TOM). Visto isso, Ogilvie (1990) indica que orbitais *não têm existência física*: são meramente funções matemáticas úteis como conjuntos de base para cálculos teóricos. Nesses termos, não haveria sentido em atribuir realidade a uma função matemática, devido a essa ser uma abstração.

Outros argumentos são colocados por Ogilvie (1990) para rejeitar a existência dos orbitais: a natureza aproximativa desse conceito, e a impossibilidade de derivar um observável a partir do mesmo. Em relação ao primeiro argumento, Ogilvie (1990) descreve

que diversos métodos são empregados visando obter as funções de onda de sistemas polieletrônicos²⁰. Cita como exemplo o método Hartree-Fock, em que se considera a repulsão *média* entre os elétrons em sistema polieletrônicos, não correspondendo, portanto, à repulsão intereletrônica real. A natureza aproximativa dos orbitais, na compreensão de Ogilvie (1990), acarretaria em sua identificação como constructos matemáticos, sem relação com a realidade. Além disso, salienta, sem entrar em maiores detalhes, que não podemos extrair uma propriedade observável a partir da definição de um orbital como uma solução de uma equação diferencial.

Há, ainda, um segundo argumento de Ogilvie (1990) para rejeitar a existência dos orbitais. Ogilvie (1990) esclarece que as funções de onda são *artefatos* apenas da Mecânica Ondulatória de Schrödinger. Outras abordagens independentes, tais como a Mecânica Matricial de Heisenberg, Jordan e Born, não apresentam um análogo às funções de onda da Mecânica Ondulatória para descrever o mundo quântico. Vale assinalar que o próprio Schrödinger apontou a equivalência entre as duas teorias. Ainda assim, Ogilvie (1990) considera que as duas teorias diferem em seus constructos matemáticos mais particulares. Assim, enquanto na teoria de Schrödinger a função de onda e, por consequência, os orbitais, são próprios dessa descrição, na Mecânica Matricial, outros constructos matemáticos particulares são empregados para descrever os sistemas quânticos. Posto isso, é razoável supor que Ogilvie (1990) compreende o orbital apenas em termos epistemológicos. Não haveria uma contraparte real, independente da teoria, a qual seria designada como sendo o referente do conceito de orbital. Na argumentação de Ogilvie (1990), se existisse algo na natureza tal como um orbital, este poderia ser descrito por outras teorias diferentes da Mecânica Ondulatória de Schrödinger.

Pouco tempo depois, Simons (1991) publicou uma nota concordando com Ogilvie (1990) quanto à não existência de orbitais. A justificativa de Simons (1991) para rejeitar a existência de orbitais se baseia na suposição de que “*todas as quantidades derivadas a partir de nossos dados provenientes da aplicação de modelos, teorias e suas equações associadas, não são ‘reais’*” (SIMONS, 1991, p. 131, *itálico do autor*). Para esse autor, modelos, teorias e equações são concebidos por nossa imaginação e visam organizar de maneira sistemática os dados obtidos experimentalmente. Simons (1991) considera que os diferentes modelos são considerados mais ou menos úteis conforme o grau de precisão na representação e na previsão dos dados experimentais. Assim, esse autor compreende o orbital como um modelo que, apesar de se basear em dados experimentais (realidade), não é real.

²⁰ Ogilvie (1990) não discute a questão dos sistemas monoeletrônicos, em que seria possível obter, segundo alguns autores, uma *solução exata* para a equação de Schrödinger.

Dois anos após a publicação de Ogilvie (1990), Linus Pauling publicou um artigo apontando brevemente diversos erros conceituais, particularmente as compreensões referentes à Mecânica Quântica, presentes naquela publicação. Restringindo-nos à questão da existência ou não de orbitais, Pauling (1992) descreve que há uma compreensão equivocada quanto ao significado de *coisas*, tal como expresso no subtítulo do trabalho de Ogilvie: Não existem *coisas* tais como orbitais. Para ilustrar isso, Pauling (1992) recorre à definição de *coisa*, extraída de um dicionário, como algo que pode ou não se tornar objeto do pensamento. Nesses termos, um orbital não precisa ser algo tangível ou concreto, de modo que pode ser representado através de um símbolo, particularmente a função de onda. Excetuando-se essa crítica semântica, Pauling (1992) ratifica a defesa de que orbitais não existem concretamente, tal como alegado por Ogilvie (1990); todavia, complementa que, enquanto objetos de pensamento, os orbitais existem ou, nos termos de Simons (1991), são reais.

No mesmo volume em que Pauling (1992) publicou suas críticas ao artigo de Ogilvie (1990), três cartas foram publicadas sobre o assunto (EDMISTON, 1992; SCOTT, 1992; SCERRI, 1992). Scott (1992) e Scerri (1992) não esboçam qualquer comentário quanto ao estatuto ontológico do orbital; no entanto, é razoável inferir que ambos concordam com a alegação de Ogilvie (1990), a saber, a de que orbitais não existem, pelo fato de não terem apresentado argumentos contrários à alegação. O primeiro foca sua argumentação primordialmente na questão do reducionismo da Química em relação à Física, enquanto o segundo discute que mesmo os métodos mais sofisticados de construção de orbitais apresentam discordâncias entre o que é deduzido teoricamente e o que é verificado experimentalmente, particularmente a questão referente a qual orbital, a saber, 4s ou 3d, é preenchido preferencialmente.

Edminston (1992) parece compreender o orbital como um instrumento heurístico, pois descreve que “orbitais são um modo para representar aproximadamente funções de onda de uma maneira visualizável” (EDMINSTON, 1992, p. 600), e que sem orbitais é impossível compreender a Química, ou ensiná-la. Apesar dessa colocação, o autor não explicita se o orbital, ou mesmo suas representações, tem um *significado físico*, isto é, qual a relação de tal conceito com a realidade.

2.2.2. O conceito de orbital em cursos introdutórios de Química Geral – a controvérsia

Em seu artigo rejeitando a existência dos orbitais, Ogilvie (1990) tece, também, considerações em relação ao ensino desse conceito. Segundo ele, o ensino da Química Quântica, aplicada à descrição da estrutura molecular e suas propriedades nos cursos

iniciais da graduação, como é visto, por exemplo, em livros didáticos de Química Geral, é desnecessário e irrelevante. Ogilvie (1990) nota que os autores de livros de Química Geral carecem de uma compreensão profunda sobre a Química Quântica, transmitindo compreensões equivocadas sobre ela, tal como a existência de orbitais. Segundo esse autor, tais equívocos ocorrem por conta de um ensino qualitativo de uma teoria essencialmente matematizada: “as explicações qualitativas (vagas, superficiais) da estrutura molecular e das reações, baseadas em orbitais e afins, não são ciência (isto é, são sem sentido) e devem ser, portanto, completamente rejeitadas” (OGILVIE, 1990, p. 288). Como veremos, as discussões que se seguiram a esse artigo se originaram, essencialmente, nesse último parágrafo de Ogilvie (1990), mais do que na afirmação de que os orbitais não existem, presente no subtítulo do artigo.

Pauling (1992) concorda que os orbitais, particularmente os orbitais moleculares, devem ser negligenciados em cursos introdutórios, embora não apresente seus argumentos para isso, provavelmente concordando com Ogilvie (1990) em relação à matemática avançada necessária para compreendê-los adequadamente. Apesar disso, salienta que a Mecânica Quântica tornou a ligação química mais útil por meio da sistematização e simplificação da ciência Química. Nessa perspectiva, Pauling (1992) destaca que os cursos introdutórios de Química devem privilegiar aspectos clássicos da ligação, como, por exemplo, os aspectos simples da estrutura molecular e sua relação com as propriedades da substância. Para tanto, recomenda que se recorra a conceitos semi-quânticos e qualitativos, como a estrutura eletrônica dos átomos baseada na estrutura dos gases nobres, o compartilhamento do par de elétrons na ligação, a escala de eletronegatividade, o caráter parcialmente iônico das ligações, etc.

Diferentemente de Ogilvie (1990) e Pauling (1992), que rejeitam o ensino de orbitais em cursos introdutórios, Simons (1991) e Edmiston (1992) salientam que esse conceito é importante tanto para a pesquisa em Química, quanto para o Ensino de Química, pois fornece uma estrutura teórica para organizar os padrões observados em experimentos, ainda que esse conceito não seja real. Segundo Edmiston (1992), é impossível compreender a Química e, principalmente, ensinar a Química, sem o conceito de orbital.

2.2.3. Características gerais deste debate

Tendo traçado os principais pontos desse debate, nota-se que não há qualquer comentário contrário a Ogilvie (1990) em relação à não existência dos orbitais nas discussões travadas no *Journal of Chemical Education*. Constata-se que a literatura da época rejeitou, mesmo que implicitamente em alguns casos, a existência de orbitais. Apesar

do subtítulo categórico e provocativo do artigo de Ogilvie (1990), *Não existem coisas tais como orbitais*, a controvérsia repousou essencialmente sobre o ensino ou não desse conceito em cursos introdutórios de Química Geral, uma consequência esperada, considerando-se os propósitos do periódico em que foi travada tal discussão.

Pode-se acrescentar, ainda, que, se por um lado esses autores consideram os orbitais como equações matemáticas que não se referem a estruturas existentes, por outro, sugerem que os orbitais são construídos por meio de dados experimentais. Não se observa uma problematização sobre esse aspecto, pois, apesar de apontarem que os orbitais são baseados em dados experimentais, nenhuma consequência ontológica é discutida pelos autores por conta de tal relação com a realidade. Esses autores transmitem implicitamente a compreensão de que essa realidade existe de fato, mas não explicitam ou, no mínimo, não enfatizam suficientemente *o que é descrito e qual é o estatuto ontológico do que é descrito por meio dessas equações matemáticas*.

Há, ainda, outra característica saliente na argumentação desses autores, que consideram o conceito de orbital de um modo *instrumentalista*, isto é, consideram-no útil na descrição e previsão de fenômenos químicos, mas sem atribuir a ele uma realidade ontológica. Essa é, em linhas gerais, uma postura *antirrealista científica* em relação ao conceito de orbital.

A discussão sobre o estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais foi travada principalmente em periódicos dedicados à Filosofia da Ciência, principalmente os relativos à Filosofia da Química, motivada por um aspecto que sequer foi cogitado pelos autores deste período: a possibilidade de se observar os orbitais. A partir dessa questão, os debates se aprofundam, tanto pela diversidade de argumentos quanto pela profundidade com que os autores se detêm sobre cada um deles.

2.3. Orbitais foram observados diretamente? – O caso da revista *Nature*

2.3.1. Sobre o trabalho que originou a controvérsia e sua repercussão na comunidade científica

Em 1999, a conceituada revista *Nature* apresentou, na capa de sua edição nº 6748, o título *Orbitais observados*, e imagens do que seriam orbitais d_z^2 , extraídas do artigo de Zuo e colaboradores (1999). Esse trabalho, denominado *Observação direta de buracos de orbitais d e ligação Cu-Cu no Cu_2O* , foi produzido por um grupo da Universidade do Arizona, Estados Unidos. Nos próximos parágrafos apresentamos um sumário desse trabalho, com o

intuito de entendermos o que foi realizado e divulgado por esses autores, antes de adentrarmos nos debates que se seguiram.

Zuo e colaboradores (1999) apontam que a compreensão da ligação Cu-O é essencial para subsidiar a teoria de supercondutores de óxidos de cobre a altas temperaturas. Na referida pesquisa, o Cu^+ foi tomado como objeto de estudo. Como descrevem os autores, em muitos compostos o Cu^+ apresenta a última camada completamente preenchida, isto é, uma configuração $[\text{Ar}]3d^{10}$. Apesar disso, em muitos compostos constata-se uma distância curta entre os íons cobre, sugerindo uma ligação metal-metal, fato que não é esperado devido às camadas totalmente preenchidas. Para explicar a formação dessa ligação, os autores apontam que a seguinte hipótese tem sido defendida na literatura: orbitais eletrônicos de números quânticos elevados – 4s e 4p, no caso do Cu – são empregados para a formação da ligação, tendo como consequência a criação de buracos nos orbitais totalmente preenchidos do íon Cu, isto é, um elétron é promovido para um orbital de mais alta energia, resultando em uma vacância no orbital de origem (como, por exemplo, uma configuração $[\text{Ar}]3d^9 4s^1$).

Sobre a metodologia de pesquisa, os autores relatam que a cuprita (Cu_2O) foi investigada por meio do emprego conjunto de duas técnicas experimentais: a difração de raios-X e a difração de elétrons. Cada uma das técnicas envolve diferentes interações entre a matéria e a radiação ou feixe de elétrons e, por consequência, diferentes espalhamentos, de modo que fornecem informações complementares a respeito da topologia da amostra. Os dados obtidos foram refinados pelo método multipolo, o qual fornece a soma das densidades *pseudo-atômicas não-esféricas*. Paralelamente à determinação do mapa da densidade de carga experimental, os autores empregaram os cálculos de multi-configuração de Dirac-Fock visando determinar a densidade de carga esférica²¹ para os íons em questão. Esses cálculos geram um mapa de densidade de carga teórica. A diferença entre o mapa de densidade de carga empírico, de um lado, e o mapa de carga teórica, do outro, resulta nas imagens dos orbitais d_z^2 expostos na capa da revista *Nature*²². Os autores chegaram à conclusão de que tal mapa de densidade de carga revela a existência de uma contribuição covalente na ligação Cu-Cu:

A correspondência entre nosso mapa experimental e os clássicos diagramas dos orbitais d_z^2 esboçados nos livros didáticos é marcante. Todos os nossos mapas de diferença mostram uma forte distorção de carga não-esférica ao redor dos átomos de cobre, com as formas características dos orbitais d [particularmente os orbitais d_z^2]. (ZUO et al., 1999, p. 51)

²¹ Essa suposição considera que a interação entre os íons da cuprita é puramente iônica.

²² A metodologia empregada para determinar a densidade de carga por Zuo e colaboradores (1999) é denominada de semi-empírica, visto que há o uso tanto de dados experimentais quanto de cálculos teóricos *ab initio*.

Os autores explicam que a distribuição de carga não-esférica no Cu^+ se deve à hibridização de orbitais d da camada totalmente preenchida com orbitais de alta energia desocupados. Por restrições de simetria, apenas a hibridização entre o orbital $3d_{z^2}$ e $4s$ é permitida. Por consequência, quando essa hibridização ocorre, o orbital d_{z^2} torna-se semi-preenchido ou, nos termos dos autores, forma-se um buraco no orbital d. Assim, segundo Zuo e colaboradores (1999), a densidade de carga determinada, bem como as imagens apresentadas pelos autores (Figura 1), se referem a esse orbital $3d_{z^2}$ semi-preenchido.

Figura 1 – Imagens do orbital d_{z^2} exibidas por Zuo e colaboradores (1999, p. 50)

Por sua vez, o editorial da revista *Nature*, apresentando o título *Elétrons vistos em órbita* (HUMPHREYS, 1999, p. 21), vai além do descrito por Zuo e colaboradores (1999) ao afirmar, sem nenhum tipo de ressalva, que orbitais *foram observados diretamente*. Além disso, corrobora a suposta relação de correspondência entre os orbitais d_{z^2} e os diagramas de orbitais dos livros didáticos, ao afirmar que “a clássica forma dos orbitais dos elétrons em livros didáticos foi agora observada diretamente” (HUMPHREYS, 1999, p. 21). O editorial da *Nature* acrescenta que:

Pela primeira vez, a forma marcante de alguns dos orbitais do elétron é revelada experimentalmente. [...] O artigo de Zuo *et al.* é notável, porque a qualidade de seus mapas de densidade de carga permite, pela primeira vez,

uma 'imagem' experimental direta para ser comparada com a forma complexa do orbital d_z^2 . (HUMPHREYS, 1999, p. 21, grifo nosso)

A alegação da observação direta dos orbitais teve um grande impacto na comunidade de químicos e físicos: os primeiros consideraram que esse foi um dos eventos mais importantes do ano de 1999 na Química (ZURER, 1999, *apud* LABARCA & LOMBARDI, 2010); enquanto que os últimos indicaram que esse foi um dos destaques daquele ano na Física (YAM, 1999, *apud* LABARCA & LOMBARDI, 2010).

Além disso, as afirmações acima foram rapidamente divulgadas, sem maiores ressalvas, em outros meios. Na página eletrônica do periódico *Scientific American*, por exemplo, afirmou-se que a primeira imagem real dos orbitais atômicos do Cu_2O (LEUTWYLER, 1999) havia sido obtida. Considerando o objetivo de uma revista tal como a *Scientific American*, a saber, o de divulgar os resultados da ciência para um público mais amplo, conclui-se que não apenas a comunidade científica teve conhecimento de que orbitais foram observados diretamente, mas é provável que uma parcela de professores de ciências e estudantes de ciências também teve conhecimento dessa afirmação, direta ou indiretamente.

Não obstante a alegação da observação de orbitais divulgada pela revista *Nature* em 1999, outras observações de orbitais, ainda que não tão categóricas em alguns casos, foram alegadas posteriormente na literatura: *Vendo orbitais moleculares* (PASCUAL *et al.*, 2000); *Imagem tomográfica de orbitais moleculares* (ITATANI *et al.*, 2004); *Imagem de orbitais moleculares de alta resolução* (GROSS *et al.*, 2011) são alguns exemplos. Tais trabalhos não causaram a mesma repercussão na literatura de filosofia de química como o trabalho publicado por Zuo e colaboradores (1999). Todavia, alguns autores tomam como ponto de partida para discussão esses trabalhos mais recentes, razão pela qual também serão incluídos nas considerações a seguir.

2.3.2. Orbitais existem? Eles podem ser observados? – um debate na literatura

Muitos trabalhos foram publicados após a alegação de que orbitais foram observados diretamente visando discutir aspectos ontológicos e epistemológicos desse conceito, centrando-se, especialmente, na questão da existência ou não dos orbitais, na possibilidade ou não de observá-los, e, de maneira geral, na natureza desse conceito (SCERRI, 2000c; CRASNOW, 2000; WANG & SCHWARZ, 2000; SCERRI, 2001; JENKINS, 2003; OSTROVSKY, 2005; SCHWARZ, 2006; SHAHBAZIAN & ZAHEDI, 2006; PESSOA JR., 2007; LABARCA & LOMBARDI, 2010; MULDER, 2010; MULDER 2011; OGILVIE, 2011).

Observa-se que diferentes perspectivas são defendidas na literatura em relação aos seguintes aspectos: *o que é um orbital?* – isto é, ao que se refere na teoria quântica, e qual é sua relação com a realidade; *qual o estatuto ontológico de descrições orbitais exatas e aproximadas?*; *orbitais podem ser observados?*; *qual o significado das imagens dos orbitais d_z^2 publicadas pela revista Nature*, e *qual a relação dessas imagens com os diagramas de orbitais de livros didáticos*; e *a questão da existência dos orbitais sob um viés estritamente filosófico*, ou seja, aceitar ou rejeitar a existência de orbitais tendo em vista a orientação filosófica adotada (realista ou antirrealista). Sistematizaremos os debates a seguir, tendo em vista cada um desses aspectos; contudo, esclarecemos que as questões se encontram entrelaçadas nas argumentações dos autores.

2.3.2.1. O que é um orbital?

No que tange a esse aspecto, há uma indicação inicial entre os autores de que o orbital é “uma função de onda [Ψ] que descreve o estado de um único elétron [função monoelétrica] em um átomo ou molécula em termos das coordenadas espaciais do elétron” (LEVINE, 2000, p. 134, *apud* JENKINS, 2003). Assim, em um primeiro momento, não há conflito entre os autores em conceber o orbital como uma equação matemática no corpo da Mecânica Quântica. Contudo, as divergências entre os autores, quanto à existência ou não dos orbitais, se iniciam quando se discute se há relação dessa equação matemática com a realidade.

Ogilvie (2011) contesta categoricamente a alegação da existência de orbitais e, por consequência, a observação dessas entidades. Segundo Ogilvie (2011), as funções de onda Ψ são fórmulas matemáticas que existem em um domínio puramente matemático e, portanto, seria um absurdo medir, em um experimento físico, uma fórmula matemática. Tendo em vista esses argumentos, Ogilvie (2011) aponta que a observação de orbitais é, em princípio, impossível. Esse autor esclarece que existem propriedades de átomos e moléculas, ainda que não explicitadas em seu trabalho, que podem ser medidas experimentalmente, sendo descritas, assim, como observáveis físicos. Entretanto, a função de onda orbital, sendo uma fórmula matemática, não se inclui como uma propriedade mensurável. Visto isso, esse autor concebe que o orbital, enquanto um constructo matemático, não possui nenhuma relação com a realidade e, por consequência, não haveria na Natureza algo que pudéssemos denominar de *orbital*.

Ostrovsky (2005) rejeita a afirmação acima de que orbitais são constructos matemáticos. Segundo esse autor, orbitais não são constructos apenas matemáticos, pois estão apoiados em informações físicas e representam propriedades físicas objetivas e

aspectos qualitativos da Natureza, tais como a relação entre o movimento do elétron e o campo médio do conjunto formado pelos outros elétrons e o núcleo atômico. Além disso, aponta que as funções de onda são a contraparte quantitativa dos orbitais, os quais permitem um refinamento das teorias por intermédio dos resultados experimentais obtidos a partir de seu emprego. Nesses termos, notamos que Ostrovsky (2005), embora não seja categórico quanto à existência de algo na Natureza tal como um orbital, aponta que há uma relação dialética, no sentido de que a realidade subsidia a construção de tal função e esta, por sua vez, gera previsões sobre a realidade que, após a análise de cálculos teóricos e dados empíricos, levam ao refinamento da função de onda.

A consideração de Ostrovsky (2005) levanta a questão de o que seria essa contraparte na Natureza que poderia, supostamente, ser identificada como um orbital. Na maioria dos artigos analisados, há a concepção de que o orbital é uma *entidade*, ainda que sem qualquer esclarecimento por parte dos autores em relação ao significado desse termo. Mesmo aqueles que rejeitam a existência de orbitais fazem uso de tal termo, no sentido de descrever que *não existe tal entidade na Natureza*. No entanto, há um contraste com a compreensão inicial indicada por boa parte dos autores no início desta seção, de acordo com a qual *a função de onda é um estado do elétron*.

Somente Mulder (2010; 2011) rejeita explicitamente a alegação de que orbitais são entidades, o que evitaria a inconsistência em se colocar a questão sobre a existência dos orbitais. Primeiramente, “orbitais são estados, não entidades” (MULDER, 2011, p. 29). Em Física, o estado fornece as condições do sistema descrito em certo tempo (MULDER, 2010). Para esse autor, conceitos, tais como as células, levantam questões quanto ao existir ou não, ou, ainda, se essas se referem ou não a algo presente na Natureza. Entretanto, para estados não se colocam tais questionamentos, podendo-se, por outro lado, indagar qual é o ‘valor’ determinado, por meio da função de onda Ψ , para o estado do sistema (MULDER, 2011). Assim, afirmar a existência ou não da função de onda seria sem significado, pois “orbitais são predicados dos elétrons e, por isso, não têm uma existência independente tal como entidades têm” (MULDER, 2010, p. 180-181).

Há, também, uma parcela de autores que considera um significado adicional para esse conceito, a saber, o orbital se referindo à densidade de probabilidade, isto é, à função de onda Ψ elevada ao quadrado $[\Psi^2]$. Por exemplo, no próprio trabalho de Zuo e colaboradores (1999) constata-se que as investigações efetuadas levaram à determinação da *densidade de carga* – uma grandeza proporcional à densidade de probabilidade dada por $\rho(r) = e|\Psi(r)|^2$, onde e é a carga do elétron – do orbital d_z^2 . É a partir desse conceito que os autores concebem as imagens da Figura 1, as quais foram denominadas de orbitais por

eles e, além disso, foram relacionadas com os diagramas de orbitais presentes em livros didáticos de Química Geral.

Mulder (2011) admite que outro significado para o termo *orbital*, além de uma função monoelétrica, é amplamente disseminado na Química, a saber, o orbital como a densidade elétrica ou densidade de carga. Esse autor esclarece que “com cada função de onda monoelétrica vem uma função de densidade de probabilidade [$\rho = |\Psi|^2$] sobre o espaço real para a posição do elétron” (MULDER, 2011, p. 31). Por conta de tal relação, o conceito de orbital está intimamente relacionado com a densidade elétrica. Uma consequência dessa ambiguidade quanto ao significado do orbital é transmitir uma compreensão equivocada em relação ao que seja um estado quântico (MULDER, 2010). Enquanto a primeira caracterização do orbital remete a um *estado quântico*, a segunda sugere que os orbitais são *entidades*. Esta última compreensão é transmitida, segundo Mulder (2011), pelas imagens dos orbitais exibidas pela *Nature* e por livros didáticos de Química Geral.

Labarca e Lombardi (2010) também concordam que a compreensão dos orbitais como remetendo à densidade de probabilidade encontra-se amplamente disseminada na Química, e procuram justificar essa interpretação. Esses autores defendem que as concepções provenientes da Mecânica Quântica são tomadas, aparentemente, de modo peculiar pela Química Molecular, a qual identifica os diferentes tipos de moléculas e estuda suas propriedades individuais e coletivas. Para Labarca e Lombardi, a característica central da molécula é a sua forma, que desempenha um papel fundamental na compreensão das propriedades físico-químicas da matéria, e que é explicada pelo arranjo espacial dos átomos e pela forma de seus orbitais. “Assim, o termo ‘orbital’ precisa ter um conteúdo espacial a fim de considerar as disposições geométricas dos átomos nas moléculas” (LABARCA & LOMBARDI, 2010, p. 154). Os autores apontam que a única compreensão do orbital que permite vislumbrá-lo espacialmente é o de uma *região no espaço* onde é mais provável se encontrar um elétron. Desse modo, na Química Molecular, o orbital é compreendido de um modo distinto em relação à Mecânica Quântica, isto é, o orbital como a densidade de probabilidade.

Labarca e Lombardi (2010) assinalam que a compreensão do orbital como densidade de probabilidade teria, como consequência, um estatuto ontológico realista para os orbitais, diferentemente de seu estatuto na Física Quântica, em cujo âmbito os orbitais seriam não

existentes²³. Desse modo, haveria uma *descontinuidade qualitativa* entre as compreensões da Física Quântica e da Química Molecular:

No contexto químico, moléculas são objetos não quânticos no sentido local e individual: elas têm propriedades definidas em qualquer tempo, preservam sua identidade através da mudança de propriedades, e sempre possuem não somente uma posição definida, mas também uma forma definida. (LABARCA & LOMBARDI, 2010, p. 154).

Diante dessa perspectiva, os constituintes moleculares seriam compreendidos de modo distinto: as moléculas seriam entidades individuais; o núcleo seria descrito classicamente por meio da aproximação de Born-Oppenheimer; e o elétron seria descrito semi-classicamente, pois não seria governado por equações de movimento clássico, mas por uma equação que determina sua posição apenas estatisticamente.

Segundo Labarca e Lombardi (2010), a compreensão da Química Molecular em relação ao orbital é tão legítima quanto aquela sugerida pela Mecânica Quântica. Ambas podem coexistir, tanto do ponto de vista epistemológico quanto ontológico. Em relação ao aspecto ontológico, os autores afirmam que “as entidades químicas não precisam do apoio das entidades quânticas para legitimar sua existência objetiva” (LABARCA & LOMBARDI, 2010, p. 156). A defesa de diferentes estatutos ontológicos para o orbital no âmbito da Química e no da Mecânica Quântica é descrita pelos autores como um pluralismo ontológico. Tal posição visa combater o reducionismo ontológico da Química à Física, considerado por muitos filósofos da química como quase inevitável (SCERRI & MCINTYRE, 1997; NEEDHAM, 2006; VIHALEMM, 2010; MANAFU, 2013).

2.3.2.2. Qual o estatuto ontológico de descrições exatas e aproximadas de orbitais?

Outra questão presente na literatura, relacionada à existência dos orbitais, bem como aos limites e possibilidades desse conceito, discute se *descrições exatas* ou *aproximadas* resultam em diferentes estatutos ontológicos para os orbitais.

Como descrito anteriormente, há um consenso preliminar entre os autores de que o orbital é a função de onda de um único elétron. Para se obter uma dada função de onda é necessário resolver a equação de Schrödinger para o sistema em questão. Diante dos objetivos pretendidos, apresentamos a mais simples, denominada *equação de Schrödinger clássica*, que se caracteriza por ser temporalmente independente e constituída de diferenciais parciais para as três dimensões espaciais (LOWE & PETERSON, 2006):

²³ Labarca e Lombardi (2010) parecem sugerir que essa é a única compreensão possível de orbitais na Física Quântica. Entretanto, veremos mais adiante que, embora legítima e amplamente disseminada, essa não é a *única* interpretação partilhada pela comunidade de físicos quânticos.

$$\left[\frac{-h^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (1)$$

$$H\Psi = E\Psi \quad (2)$$

onde h é a constante de Planck e m é a massa de uma única partícula movendo-se em um campo de potencial tridimensional V . O lado esquerdo da equação (1), particularmente a expressão entre colchetes, é denominado de *operador hamiltoniano* H do sistema. O lado direito da equação (1) ilustra que, para cada função de onda Ψ obtida, uma energia quantizada está associada. Muitas vezes, a equação de Schrödinger é expressa, de modo simplificado, pela equação (2).

Schwarz (2006) e Scerri (2001) ressaltam que não existe uma *única equação de Schrödinger* e, por consequência, *um único tipo de orbital*, pois diferentes métodos (ou condições de contorno) podem ser adotados para se resolver a equação de Schrödinger, como, por exemplo, considerar ou não o efeito da repulsão intereletrônica.

Visto isso, Schwarz (2006) destaca que existem tipos bem definidos de orbitais, cada qual visando descrever um determinado fenômeno químico apropriadamente, e amparados por diferentes métodos. Esses orbitais são provenientes tanto de metodologias *ab initio* quanto de metodologias semi-empíricas. Para esse autor, essas metodologias não diferem em princípios, mas na quantidade de conceitos e teorias utilizadas em sua obtenção. Para ilustrar a diversidade de orbitais possíveis, Schwarz (2006) e Scerri (2001) citam os seguintes: orbitais canônicos ou localizados; Hartree-Fock; densidade funcional ou orbitais naturais, ou orbitais de Dyson; orbitais de Brückner ou Möller; orbitais de Kohn-Sham; orbitais de Hylleraas. O emprego de cada um desses orbitais dependerá do caso e da precisão desejada. Diante da diversidade de orbitais, Schwarz (2006) argumenta que, quando falarmos em orbitais, devemos especificar a qual tipo de orbital estamos nos referindo.

No debate levantado na literatura sobre o estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais, constatamos que nenhum dos autores analisados segue a orientação sugerida por Schwarz (2006). Contudo, esses autores explicitam que diferentes métodos são empregados visando obter soluções da equação de Schrödinger *mais precisas*, o que transmite implicitamente a ideia de que diferentes orbitais são produzidos.

Eric Scerri, um dos primeiros autores a levantar críticas de natureza ontológica e epistemológica quanto à alegação da observação de orbitais divulgada pela revista *Nature*, avalia que a equação de Schrödinger somente possui uma *solução exata* para sistemas monoelétrônicos (SCERRI, 2001), isto é, espécies com apenas um elétron, como, por exemplo, o átomo de hidrogênio, átomos hidrogenoides, tais como o He^+ , Li^{2+} , ou Be^{3+} , e o

íon molecular dihidrogênio H_2^+ . Nesses casos, Scerri (2001) defende que orbitais existem, mas são *inobserváveis por princípio*. Por outro lado, em sistemas polieletrônicos (número de elétrons ≥ 2), Scerri (2001) aponta que o modelo orbital é uma aproximação, de modo que “o termo científico ‘orbital’ é estritamente sem referência, com a exceção de quando é aplicado para o átomo de hidrogênio ou outros sistemas de um elétron” (SCERRI, 2001, p. S79).

Scerri (2001) explica que a descrição aproximada de sistema polieletrônicos se deve ao fato de que, nesses casos, os elétrons individuais não são eles próprios estados estacionários, tal como no átomo de hidrogênio. Por consequência, os elétrons são considerados indistinguíveis, e a atribuição de números quânticos para espécies polieletrônicas, tal como fazemos no princípio Aufbau, não tem significado físico. Segundo esse autor, cálculos sofisticados são empregados visando minimizar essa disparidade entre o modelo teórico e a realidade. Scerri (2001) cita como exemplo o modelo Hartree-Fock, em que se assume que cada elétron se move em um campo médio resultante dos núcleos e de todos os outros elétrons que o circundam, de modo que as repulsões entre um dado elétron e os demais são consideradas em média, ou seja, não se referem às repulsões reais do sistema. Nesse modelo, supõe-se que os elétrons estão em todos os orbitais simultaneamente. Portanto, a natureza aproximativa desse modelo acarreta, nos termos de Scerri, a não existência de orbitais.

Assim, no caso de sistemas polieletrônicos, o conceito de orbital não faz referência a entidades do mundo natural. Em contrapartida, em sistemas monoeletrônicos, o termo orbital apresentaria uma contraparte real. Apesar disso, Scerri (2001) ressalta que os orbitais provenientes de sistemas polieletrônicos servem como “conjuntos de base, ou na forma de sistema de coordenadas, na qual a função de onda de um átomo, íon, ou molécula pode ser expandida matematicamente para qualquer grau de precisão ditado pelo poder computacional disponível” (SCERRI, 2001, p. S79). Além disso, Scerri (2001; 2000c) descreve que, mesmo sendo o orbital estritamente sem referência nesses casos, isso não diminui a utilidade desse conceito em uma variedade de esquemas computacionais empregados na Química Quântica, em aplicações voltadas para a classificação de transições espectroscópicas, como aproximação útil para as configurações eletrônicas e em discussões de fenômenos físicos e químicos.

Conclui-se que Scerri atribui estatutos ontológicos distintos para o orbital, conforme a precisão na descrição dos sistemas quânticos: orbitais de sistemas monoeletrônicos existem, pelo fato de descreverem *exatamente* os sistemas; enquanto os orbitais de sistemas polieletrônicos não existem, pelo fato de descreverem os sistemas de maneira apenas *aproximada*.

A distinção entre *soluções exatas* e *aproximadas* da equação de Schrödinger é corroborada também por livros de Química Quântica, como, por exemplo, o livro de McQuarrie e Simon (1997), no qual se lê, no subtítulo do capítulo 6, que a “equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio pode ser resolvida exatamente” (MCQUARRIE & SIMON, 1997, p. 191, grifo nosso). Mais adiante nesse capítulo lê-se que a “equação de Schrödinger para o átomo de hélio [*i.e.*, *um átomo polieletrônico*] não pode ser resolvida exatamente” (MCQUARRIE & SIMON, 1997, p. 219, grifo nosso).

Diferentemente de Scerri (2001), Ogilvie (2011) esclarece que a *solução algébrica exata* não é, de fato, a melhor descrição possível (ou uma descrição mais fiel do sistema), pois a equação de Schrödinger faz uso da aproximação de Born-Oppenheimer, e também não considera os efeitos relativísticos, para citar algumas de suas deficiências. Assim, Ogilvie (2011) conclui que, mesmo nos casos em que a solução analítica da equação de Schrödinger é dita ser *exata*, a saber, para espécies monoelétrônicas, a função de onda serviria somente como uma aproximação. Por isso, Ogilvie considera que aproximações existem tanto em sistemas monoelétrônicos quanto em sistemas polieletrônicos. Como indicado anteriormente, Ogilvie (2001) rejeita a existência dos orbitais em qualquer âmbito, pois os considera somente como constructos matemáticos e, por isso, impossíveis de existirem por princípio, independente do grau de aproximações empregado.

Assim como Ogilvie (2001), Schwarz (2006), um especialista em Química Quântica, salienta que mesmo o caso exemplar do átomo de hidrogênio, indicado amplamente como uma das poucas espécies em que é possível obter uma solução analítica *exata* da equação de Schrödinger (SCERRI, 2001; MCQUARRIE & SIMON, 1997), não reproduz exatamente a realidade. Esse autor vai além dos exemplos de Ogilvie (2001), indicando os aspectos que não são considerados nessa descrição:

As diferenças são devido à extensão espacial e ao borramento quântico [*quantum smearing*] do próton, sua carga elétrica e a distribuição do dipolo magnético, a ‘interação fraca’ e a interação gravitacional entre próton e elétron, os efeitos da eletrodinâmica quântica (deslocamento de Lamb devido à flutuação eletromagnética no vácuo e a criação virtual do par elétron-pósitron nas vizinhanças dos núcleos), a supressão da extremidade do decaimento exponencial do orbital eletrônico a grandes distâncias devido a perturbações do ambiente por campos de radiação e fluxo de partículas, etc. (SCHWARZ, 2006, p. 1517)

Schwarz (2006) salienta que a medição de um objeto na Natureza é sempre realizada por meio de aproximações da teoria, de modo que a designação de uma *descrição exata*, tal como expresso por alguns autores, seria enganosa, pois há uma série de aproximações em qualquer descrição da Natureza. No caso dos orbitais, essas aproximações dizem respeito, por exemplo, a negligenciar todos os aspectos mencionados por Schwarz na citação acima. Apesar disso, Schwarz (2006) aponta que, se os dados

obtidos puderem responder satisfatoriamente à questão que levou à realização do experimento, podemos supor que as “relações do modelo teórico representam alguma estrutura objetiva da realidade” (SCHWARZ, 2006, p. 1511). Assim, conclui que “todos os conceitos experimentais são baseados em algumas aproximações idealizadas. Igualmente, qualquer descrição teórica precisa também faz uso de aproximações” (*ibid.*, p. 1512). Schwarz (2006) acrescenta, ainda, que o valor epistêmico das aproximações é produzir explicações teóricas simples e intuitivamente claras.

Posto isso, Schwarz (2006) retoma a alegação de Scerri (2001) de que, para espécies polieletrônicas, os orbitais não teriam referentes na Natureza. Segundo Schwarz, um sistema molecular pode ser aproximadamente descrito pela função de onda, desde que todos os parâmetros observáveis sejam bem definidos. Além disso, a consideração de que a aproximação orbital é satisfatória dependerá do átomo ou molécula em questão, do estado que descreve essa molécula, e do tipo de questão que se coloca.

Assim, diferentemente de Scerri (2001), que atribui estatutos ontológicos distintos, por princípio, para orbitais provenientes de espécies monoelétrônicas (descrições exatas) e polieletrônicas (descrições aproximadas), Schwarz (2006) argumenta que em ambos os casos há a possibilidade de as descrições se referirem a algo na Natureza, desde que as descrições provenientes do modelo teórico sejam satisfatórias quando comparadas com os dados levantados experimentalmente.

De modo análogo a Schwarz (2006), Labarca e Lombardi (2010) argumentam que, se uma aproximação implicar em não referência de uma entidade, tal como alguns autores defendem, não somente orbitais não existiriam, “mas todo o mundo descrito pela ciência seria banido como um todo” (LABARCA & LOMBARDI, 2010, p. 152). Segundo esses autores, a descrição aproximada de espécies polieletrônicas não implica a não existência de orbitais, muito menos a inexistência de regiões onde a probabilidade de encontrar o elétron seria elevada. Para justificar isso, os autores apresentam como analogia o movimento dos planetas do sistema solar: a descrição da atração gravitacional entre, no mínimo, três planetas do sistema solar é um problema que não pode ser resolvido analiticamente. As equações do movimento gravitacional não são independentes, pois, ao determinar a equação do movimento que descreve a atração entre dois dos três planetas, o planeta que não é descrito por essa equação tem influência na atração dos outros dois. Para obter uma solução para esse problema, uma aproximação é considerada: negligencia-se a influência do terceiro planeta na atração gravitacional dos outros dois. Essa aproximação não implicaria a não existência das órbitas planetárias. Segundo os autores, tal analogia é válida para o caso dos orbitais, pois a não separação das funções de onda, devido ao efeito de correlação, não implicaria na não existência de orbitais.

O artigo de Ostrovsky (2005) discute o valor epistêmico das aproximações na ciência e, dentre os exemplos utilizados para ilustrar seu ponto de vista, cita o caso dos orbitais. Ostrovsky argumenta que, apesar de a Física ser considerada como uma *ciência exata*, todo físico está ciente de que *todo* o seu trabalho se dá por aproximações. Desse modo, não haveria, na Física, um problema que pudesse ser resolvido *exatamente*.

No caso dos orbitais, a posição defendida por alguns autores, de que na Mecânica Quântica apenas espécies monoelétrônicas possuem *soluções exatas* para suas respectivas equações de Schrödinger, poderia ser entendida literalmente por não especialistas, incluindo-se, aqui, estudantes de cursos introdutórios de Química Geral e Química Quântica. Segundo Ostrovsky (2005), essa posição sugere uma concepção compartilhada pela comunidade de especialistas da área. Todavia, como ressalta Ostrovsky (2005), a equação de Schrödinger é não-relativística e, portanto, uma aproximação. Mesmo a equação de Dirac, que considera os efeitos relativísticos, de modo a ter maior concordância com os dados experimentais, tal como a determinação dos níveis de energia da estrutura fina, é uma aproximação, pois não leva em consideração a interação atômica com os campos eletromagnéticos. Entretanto, existem teorias ainda mais precisas, como, por exemplo, a eletrodinâmica quântica. Ainda assim, a partir dela não emerge uma *equação exata* para ser resolvida. A eletrodinâmica quântica permite o cálculo de propriedades de átomos e moléculas com algum grau de aproximação sobre pequenos parâmetros que caracterizam efeitos relativísticos. Ostrovsky (2005) conclui que a Física é uma *hierarquia de aproximações*, e seria incoerente afirmar que uma equação ou o resultado dessa equação é *exato*.

Segundo Ostrovsky (2005), as diferenças entre as descrições, tais como a da equação de Schrödinger e da equação de Dirac, residem na precisão numérica de cada uma delas e nas interpretações e compreensões qualitativas provenientes das diferentes aproximações. Como veremos mais adiante, Jenkins (2003) propõe uma compreensão análoga, que se detém nos objetivos pretendidos tendo em vista o contexto em que é empregada uma descrição particular.

Ostrovsky (2005) afirma que as descrições aproximadas da Natureza não são limitações de nosso tempo. Ao contrário, essas abordagens permanecerão no futuro devido à própria essência da Física em descrever a Natureza: as leis físicas não são dadas *a priori*, são sempre testadas experimentalmente com algum grau de precisão. Seleciona-se uma parte do mundo para investigar, e por aproximação, negligencia-se o restante do mundo. Mesmo se uma teoria for mais exata, ainda fará uso de aproximações, que proporcionam imagens qualitativas da Natureza.

Ostrovsky (2005) acrescenta que o conhecimento unicamente de dados numéricos é insuficiente para a compreensão da realidade. A utilização de recursos cada vez mais sofisticados, visando o aumento da convergência entre os cálculos teóricos e os dados determinados experimentalmente, torna o significado físico não evidente. Ostrovsky (2005) considera que tais resultados devem ser acompanhados por *modelos explicativos*, com o intuito de fornecer uma descrição qualitativa e, geralmente, semi-quantitativa, ainda que não exibam grande precisão. Esta observação é ainda mais importante quando temos em vista os livros didáticos de Química Geral investigados por esta pesquisa, os quais se apoiam amplamente em imagens qualitativas da Natureza, acompanhadas, geralmente, de abordagens semi-quantitativas quando introduzem e discutem o conceito de orbital.

Tendo em vista que as teorias fazem uso de todo tipo de aproximações, Ostrovsky (2005) questiona como essas teorias justificam suas aproximações e seus limites de aplicabilidade. Ostrovsky (2005) salienta que uma diversidade de conceitos físicos emerge a partir de aproximações, mas há que se notar que esses conceitos não são aplicáveis a sistemas ou situações mais gerais, devido a seus limites de aplicabilidade. Nesse sentido, cabe destacar o esclarecimento feito por Schwarz (2006), de que há diferentes orbitais, cada qual visando um contexto de aplicação. Portanto, se faz necessário entender como foram concebidos, através da identificação das condições de contorno adotadas, de modo a explicitar os limites de aplicabilidade de cada um desses orbitais.

Ostrovsky (2005) não é categórico quanto ao estatuto ontológico dos orbitais. Porém, no que diz respeito a sua natureza aproximada, é possível inferir que não haveria nenhum problema para esse autor considerar que as descrições aproximadas dos orbitais remetem a algo na Natureza.

Jenkins (2003) adota outra perspectiva em relação à natureza aproximada dos orbitais, de modo a colocar em segundo plano a questão da existência dos orbitais, conforme o grau de precisão na descrição dos sistemas quânticos.

Segundo Jenkins (2003), a busca pela função de onda real nos afasta cada vez mais da imagem do orbital do átomo a que estamos habituados. Por consequência, esse autor sustenta que as diferentes aproximações visando determinar a função de onda real, avaliadas pela concordância com os resultados experimentais, são legítimas e cada qual apresenta qualidades e deficiências. Por exemplo, enquanto o modelo orbital transmitiria com mais rapidez informações sobre grupos de moléculas similares, tal identificação seria mais difícil para os casos em que a descrição da função de onda considera os efeitos de correlação. Enquanto que a descrição mais simples seria útil em certos contextos, tal como no Ensino de Química, por sua natureza majoritariamente qualitativa, a abordagem que

inclui a correlação seria útil em contextos que necessitam de extrema precisão – como, por exemplo, no cálculo dos níveis de energia utilizados em pesquisas de Química Quântica.

Segundo Jenkins (2003), essas diferentes funções de onda fornecem dois tipos de explicações: “uma explicação mais detalhada em termos dos constituintes do sistema e suas interações, e uma menos detalhada, mas frequentemente mais útil, em termos de categorias químicas mais familiares” (JENKINS, 2003, p. 1057). A primeira explicação privilegia resultados mais precisos e a segunda dá uma melhor imagem qualitativa.

Esses diferentes contextos, nos quais diferentes funções de onda são empregadas, sendo melhores ou piores aproximações, conduz à questão sobre a realidade ou não dos orbitais. Segundo Jenkins (2003), rejeitar os orbitais para aplicações particulares não ocorre por consequência de os orbitais serem reais ou não em tais condições. Pelo contrário, “rejeitamos orbitais em casos particulares porque eles não fazem previsões de resultados experimentais com uma precisão suficiente para aqueles casos particulares” (JENKINS, 2003, p. 1059). Por exemplo, o modelo orbital não leva em conta as repulsões intereletrônicas, apenas as interações elétron-próton. Assim, a precisão dos níveis de energia de espécies polieletrônicas determinados experimentalmente apresentaria um erro considerável em relação aos cálculos teóricos, pois em sistemas reais as repulsões elétron-elétron têm efeitos consideráveis nos níveis de energia. Contudo, no âmbito do ensino, a natureza primordialmente aproximada de tais diagramas de níveis de energia não seria um obstáculo para a sua utilização.

Portanto, para Jenkins, rejeitar o uso de um dado orbital, apresentando maior ou menor grau de aproximação, depende dos objetivos pretendidos, sendo, assim, uma decisão de natureza contextual. Salienta-se que o termo *rejeitar*, empregado por Jenkins (2003), diz respeito ao modelo teórico empregado em um contexto particular, e não visa abarcar o estatuto ontológico dos orbitais. Segundo esse autor, a questão da existência ou não dos orbitais é secundária.

Jenkins (2003) ainda discute brevemente a questão do reducionismo da Química em relação à Física, tendo em vista os diferentes níveis de aproximação empregados. Esse autor descreve que o fato de a Química adotar amplamente o modelo orbital, em detrimento dos modelos mais precisos empregados pela Física, não significa que na Química o orbital não apresente um referente na Natureza. Segundo ele, não existem funções de onda *realmente reais* na Física, nem orbitais são *mera aparência* na Química. Em ambos os casos trata-se de aproximações matemáticas, passíveis de interpretações controversas. Não haveria, desse modo, *a melhor descrição*: cada qual possuiria um contexto de aplicação legítimo, de acordo com a precisão da função de onda empregada e o tipo de explicação desejado no referido contexto.

2.3.2.3 Orbitais podem ser observados?

Além da discussão sobre a existência dos orbitais, outra questão em debate se refere à *observação dos orbitais*, iniciados após a revista *Nature* anunciar que *orbitais haviam sido observados diretamente*. Essa afirmação sugere, levando em conta o modo como foi divulgada, que até aquele momento os orbitais eram somente entidades teóricas, juntamente com seus diagramas correlatos, sem comprovação empírica de sua existência. Essa hipótese ganha mais força quando consideramos os trabalhos publicados no *Journal of Chemical Education*, citados anteriormente, e que saíram poucos anos antes da publicação do artigo de Zuo e colaboradores (1999).

Como mencionado, Scerri (2000c; 2001) considerava que os orbitais existem em certas circunstâncias, particularmente quando são *soluções exatas* da equação de Schrödinger. Apesar disso, Scerri (2001) também apontou que os orbitais são inobserváveis *por princípio* em quaisquer circunstâncias, isto é, a própria Mecânica Quântica caracterizaria os orbitais como inobserváveis.

Um primeiro argumento exposto por Scerri (2001) diz respeito ao fato de que “orbitais representam uma quantidade chamada amplitude de probabilidade, que tem sido conhecida por ser inobservável por princípio desde o nascimento da Mecânica Quântica” (*ibid.*, p. S87). Segundo esse autor, o termo *amplitude* da Mecânica Ondulatória foi baseado na amplitude proveniente do movimento ondulatório clássico mas, diferentemente desta última, aquela não apresenta uma trajetória clássica²⁴ ou, mais precisamente, não se refere a uma amplitude clássica: “um elétron não tem nenhuma dessas propriedades clássicas e [por consequência] não tem uma trajetória clássica” (*ibid.*, p. 87).

Scerri (2001) acrescenta que “além de uma expressão matemática, a maioria dos orbitais atômicos envolve o número i^{25} [imaginário]” (*ibid.*, p. S87), o que também é apontado por Labarca e Lombardi (2010). Scerri argumenta que um número imaginário não tem significado físico e, portanto, o que pode ser observado é a densidade eletrônica, e não a função de onda propriamente, que corresponde ao termo *orbital*. A densidade eletrônica é obtida elevando-se a função de onda Ψ ao quadrado, ou seja, $[\Psi^2]$, de maneira que a componente imaginária da função de onda é cancelada por meio dessa operação matemática, e o valor resultante se torna um número real. Scerri (2001) conclui que Zuo e colaboradores (1999) podem ter *observado* a densidade eletrônica, isto é, a função de onda

²⁴ A rigor ondas clássicas não possuem *trajetória*, esta é uma característica de partículas clássicas. Diante disso, o adequado é indicar que ondas se *propagam* no espaço.

²⁵ $i = \sqrt{-1}$

ao quadrado, e não a própria função de onda. Além disso, Scerri (2001) afirma que a distinção entre orbitais e densidades eletrônicas deve ser abordada tanto em níveis avançados quanto em níveis elementares do Ensino de Química, visando evitar esses equívocos.

Scerri apresenta ainda um terceiro argumento para rejeitar a *observação direta* dos orbitais: estes são descritos através do espaço multidimensional de Hilbert. Em consonância com Scerri (2001), Labarca e Lombardi entendem que tal questão é ainda mais problemática, pois, mesmo para uma espécie monoelétrica como o hidrogênio, “a função de onda não é uma onda no espaço físico, mas somente uma das muitas possíveis representações do estado vetorial pertencente ao espaço de Hilbert” (LABARCA & LOMBARDI, 2010, p. 153). Segundo Scerri (2001), essa característica conduziria à impossibilidade de se observar, em um espaço tridimensional, algo que é descrito em um espaço multidimensional.

Ostrovsky (2005) contesta a maioria dos argumentos expostos por Scerri (2000c; 2001); concorda, porém, com a impossibilidade de se observar *diretamente* os orbitais. Segundo Ostrovsky, *entidades ideais* não podem ser observadas diretamente e, mesmo nos dias de hoje, nada é passível de ser observado diretamente em experimentos físicos, pelo fato de que todos os aparatos experimentais empregados produzem dados que necessitam de refinamento, isto é, de interpretação. No entanto, diferentemente de Scerri (2000c; 2001), que rejeita a observação de orbitais em quaisquer circunstâncias, Ostrovsky expressa que uma aproximação física é baseada na Natureza, de modo que haveria algum grau de observabilidade nos orbitais. Sendo assim, Ostrovsky (2005) considera plausível uma *observabilidade semi-direta* dos orbitais.

Para ilustrar isso, Ostrovsky (2005) cita dois casos de observação semi-direta: a transição eletrônica entre diferentes orbitais; e a determinação da densidade eletrônica. A primeira tem sido observada há muito tempo, através das espectroscopias eletrônicas, que se referem a absorções e emissões de energia entre orbitais particulares de átomos ou moléculas. A segunda, de que trata o artigo de Zuo e colaboradores (1999), determina a distribuição do *momentum* do elétron, representada por meio da distribuição da densidade de probabilidade. Para Ostrovsky (2005), ambas as observações seriam legítimas, e não haveria razão para preferir uma ou a outra.

Além do caráter aproximado da função de onda como motivo para rejeitar a existência dos orbitais, Scerri (2001) acrescentara dois outros argumentos: a função de onda envolve números imaginários; e é descrita em um espaço multidimensional de Hilbert, não apresentando, portanto, significado físico. Em relação ao primeiro argumento, Ostrovsky (2005) explica, inicialmente, que o número complexo (ou número imaginário) se refere à

fase da onda. Esta ocorre nos seguintes casos: quando dois ou mais estados estacionários são populados coerentemente; quando o estado é não estacionário (o hamiltoniano é dependente do tempo); e quando um campo magnético está presente. As diferentes fases da função de onda são identificadas por pelos sinais positivo e negativo, e a transição entre as diferentes fases é delimitada por uma superfície nodal, isto é, uma região onde a probabilidade de se encontrar o elétron é nula. Em seguida, Ostrovsky explica que a função de onda pode ser completamente restaurada a partir da densidade de carga eletrônica ($\rho(r) = e|\Psi(r)|^2$), que é observável. A superfície nodal pode ser determinada experimentalmente a partir da densidade de carga eletrônica, fornecendo, assim, uma observação *semi-direta* da função de onda, ainda que não da própria função de onda.

Quanto ao argumento de que o espaço de Hilbert não apresenta significado físico, Ostrovsky (2005) esclarece que, quando a equação de Schrödinger é resolvida, as autofunções geradas podem ser consideradas como elementos do espaço de Hilbert de infinitas dimensões, mas também são definidas em um espaço tridimensional convencional.

Embora apresente uma diversidade de argumentos em prol da observação dos orbitais, Ostrovsky (2005) esclarece que *nunca* observamos experimentalmente quaisquer entidades, mas suas propriedades, de modo que a observação de orbitais (ou átomos, ou moléculas) é, em princípio, impossível – um argumento também utilizado por Ogilvie (2011). Em outras palavras, qualquer experimento físico implica na observação (ou medição) das propriedades do objeto em estudo. No caso dos orbitais, a observação envolveria, por exemplo, a medição da absorção ou emissão de luz nas transições entre orbitais de diferentes energias.

Mulder (2011) e Shahbazian e Zahedi (2006) discutem o caráter polissêmico do termo *observável*. Mulder define um sentido estrito e um amplo para o termo *observável*. No sentido estrito, *observável* se refere à “medição de uma quantidade física, e esta não tem nada a ver com visibilidade” (MULDER, 2011, p. 25). Este entendimento se aplica à Mecânica Quântica, na qual os orbitais são estados e, portanto, não existem, mas podem ser observados.

Para Mulder, os orbitais podem ser medidos, nos casos em que há uma *boa aproximação* para o estado do sistema, embora não especifique o que seria uma *boa aproximação*. O estado do sistema na Mecânica Quântica é dado pela função de onda Ψ que, em termos mais formais, se refere aos vetores em um espaço de Hilbert, que não são observáveis. Para obter valores observáveis, devemos utilizar “um operador que atua sobre o espaço de Hilbert do sistema, e o valor esperado de um observável O , para um sistema em estado Ψ , é dado por $\langle \Psi | O | \Psi \rangle$ ” (MULDER, 2011, p. 26).

De modo análogo, nas discussões originadas pelo artigo publicado na revista *Nature*, a observação dos orbitais foi associada à densidade eletrônica. Para Mulder (2011), essa quantidade física também é observável, pois é dada por $|\Psi|^2$, uma função sobre o espaço real. Esse ponto é corroborado por Schwarz (2006), o qual aponta que medições genuínas de orbitais têm pouco em comum com determinações de densidade eletrônica. Apesar disso, considera como um caso limite da medição de orbitais a *determinação experimental da densidade* de um orbital.

Assim, tal como descrito por Ostrovsky (2005), Mulder (2011) considera plausível a observação dos orbitais, pois, embora não seja a própria função de onda o objeto da determinação experimental, é razoável supor que ela seja determinada indiretamente. A medição indireta da função de onda não impossibilitaria a afirmação de que orbitais foram observados, ainda que ambos os autores concordem que esse termo não diz respeito a observar com os próprios olhos.

Desse modo, a observabilidade de orbitais polieletrônicos, ou mesmo monoelétrônicos, em átomos ou moléculas, nos termos colocados por Mulder (2011), dependerá do valor determinado para o estado, isto é, se existe uma melhor ou pior aproximação, tendo em vista a relação entre a descrição proveniente da função de onda e os dados determinados experimentalmente. Mulder (2011) indica que o julgamento sobre qual é a melhor ou a pior aproximação depende do âmbito empírico. Visto isso, uma boa aproximação poderia levar à observação do orbital. Segundo Mulder (2010), os argumentos para a não observabilidade de orbitais em espécies polieletrônicas apoiam-se na suposição equivocada de que orbitais sejam entidades, quando, em sua perspectiva, são estados que, a rigor, são medidos. A descrição aproximada, para espécies polieletrônicas, não inviabilizaria a observação dos orbitais.

Por outro lado, o termo *observável* pode ser compreendido em sentido amplo. Segundo Mulder (2011), na ciência o termo *observar* “abrange não somente resultados de medições diretas, mas também qualquer informação útil deduzida a partir desses resultados” (MULDER, 2011, p. 27). Assim, mesmo que nos afastemos da definição estrita de observável, proveniente da Mecânica Quântica, Mulder (2011) considera legítimo utilizar o termo *observar orbitais* quando estes nos trazem alguma informação sobre o sistema quântico.

Mulder (2011), Ostrovsky (2005) e Schwarz (2006) entendem claramente que é possível medir experimentalmente o estado calculado por meio da função de onda, ainda que indiretamente. Atribuem ainda, a essa medição, a designação de *observação*, mesmo contrastando com o entendimento do senso comum do que seja o ato de observar.

No cerne dos argumentos de Scerri (2001) e Ogilvie (2011), nota-se a postulação de que a própria Mecânica Quântica, *por princípio*, rejeitaria a observação dos orbitais. Contudo, outros autores contestam explicitamente tal alegação. Ostrovsky (2005) e Mulder (2011) expressam que a observação dos orbitais não pode ser rejeitada sobre os fundamentos da Mecânica Quântica, pois isso residiria no âmbito das investigações empíricas. Somente as investigações empíricas teriam condições de julgar se orbitais foram observados ou não. Por exemplo, Mulder (2011) descreve que um orbital será observado se o valor do estado do sistema, determinado pela função de onda, se aproxima das medições experimentais referentes a esse estado, caso contrário, esse não será observado.

Shahbazian e Zahedi (2006) descrevem que, no âmbito da Mecânica Quântica, um observável é definido a partir de um operador hermitiano. Ser hermitiano é uma propriedade de certos operadores matemáticos no espaço de Hilbert, e é “condição necessária e suficiente para a certeza de sua observabilidade” (SHAHBAZIAN & ZAHEDI, 2006, p. 40). Embora considerem essa afirmação verdadeira, Shahbazian e Zahedi esclarecem que ela não define as quantidades físicas produzidas diretamente de operadores hermitianos. Assim, coloca-se a questão da existência de quantidades observáveis que podem ser produzidas sem o intermédio de operadores hermitianos. Nessa perspectiva, não haveria garantias de que orbitais são não-observáveis, em oposição ao defendido por Scerri (2001) e Ogilvie (2011), os quais alegam que os fundamentos da Mecânica Quântica justificariam a não observação dos orbitais.

Para justificar sua argumentação, Shahbazian e Zahedi adotam uma perspectiva histórica da Física pré-quântica. No século XIX, quantidades físicas relacionadas aos espectros de emissão e absorção do hidrogênio foram determinadas e descritas por equações, como, por exemplo, a equação de Balmer. Assim, para Shahbazian e Zahedi, os níveis de energia de certos átomos foram determinados sem a orientação da teoria quântica, embora, naquele período, não houvesse uma teoria que explicasse as relações empíricas. Tal caso leva os autores a concluir que “medições de um sistema podem ser investigadas independentemente de uma base teórica dos constituintes dos sistemas em estudo” (SHAHBAZIAN & ZAHEDI, 2006, p. 41). No caso das descrições espectroscópicas do século XIX, não haveria a necessidade de se conhecer a dinâmica fundamental do subsistema, a saber, conhecer a dinâmica dos elétrons, que, aliás, somente foram descobertos no final daquele século. A quantidade física do sistema seria determinada pelo sistema como um todo (elétrons no átomo) e seria dependente de leis físicas clássicas, particularmente as equações de Maxwell, que descrevem as interações entre o sistema e os campos externos aplicados.

Shahbazian e Zahedi acrescentam uma complicação adicional, proveniente de observáveis quânticos que não possuem análogos clássicos, isto é, não apresentam contrapartes clássicas que possam ser medidas tendo como base uma teoria pré-quântica, tal como no exemplo anterior. Shahbazian e Zahedi (2006) descrevem o caso do spin do elétron, em que uma inovação mecânico quântico foi efetuada: “é possível deduzir o spin a partir das medições do momento magnético depois de definir o spin como um operador hermitiano, mas não existe um modo trivial para deduzir o spin a partir de medições brutas sem essa definição” (SHAHBAZIAN & ZAHEDI, 2006, p. 42). Diferentemente do caso anterior, esse observável somente foi definido no contexto da Mecânica Quântica; entretanto, sua concepção não foi de uma maneira direta. Desse modo, Shahbazian e Zahedi explicitam que observáveis têm sido definidos no âmbito da aplicação e desenvolvimento da teoria quântica. Portanto, “em contraste com a crença geral entre os químicos, é plausível que novos observáveis originem-se na física molecular e na Química Quântica” (ibid.). Considerando isso, é razoável supor que, se atualmente os orbitais atômicos não são observáveis, nada garante que no futuro isso se mantenha.

Shahbazian e Zahedi expõem ainda que “como resultado das equações de Hartree-Fock, orbitais são não-observáveis porque não existe uma teoria baseada em operadores para deduzi-los inequivocamente” (SHAHBAZIAN & ZAHEDI, 2006, p. 45). Nesses termos, enquanto há, no âmbito da teoria atual, um operador para se determinar a densidade de carga eletrônica, não haveria um operador análogo para se determinar uma suposta quantidade física denominada de *orbital*. Contudo, Shahbazian e Zahedi esclarecem que não há uma impossibilidade inerente à Mecânica Quântica quanto a conceber, no futuro, um operador que produza *objetos matemáticos como orbitais* e, por consequência, que os torne observáveis.

2.3.2.4. Qual o significado das imagens de orbitais divulgadas pela Nature?

Outro tópico em debate diz respeito ao significado das imagens dos orbitais d_z^2 publicadas pela revista *Nature*, e a suposta relação de correspondência entre essas imagens e os diagramas de orbitais de livros didáticos. A importância dessas imagens se deve ao fato de que foram utilizadas pela revista *Nature* com o intuito de confirmar a observação direta dos orbitais.

Diversos autores questionam o emprego das imagens dos orbitais d_z^2 feito por Zuo e colaboradores. Por exemplo, Schwarz (2006) aponta que a maioria dos pesquisadores em Química Quântica não faz uso de imagens de orbitais, tais como as exibidas por Zuo e colaboradores (1999). Em vez disso, constroem os orbitais através da solução da equação

de Schrödinger em computadores, e usam tais resultados para calcular propriedades atômicas ou moleculares. Não há apelo a imagens de orbitais nesse processo. Segundo Schwarz (2006), as imagens dos orbitais não proporcionariam informações adicionais aos fenômenos investigados e, por isso, são negligenciadas nessas investigações.

Ostrovsky (2005) concorda com Schwarz (2006), complementando que os pesquisadores dessa área confiam grandemente no poder de cálculo dos computadores utilizados, privilegiando a alta precisão numérica, em detrimento de uma compreensão qualitativa extraída de imagens dos orbitais.

Se essa descrição de Schwarz (2006) é, de fato, comum na área de Química Quântica, por que Zuo e colaboradores (1999) produziram imagens de orbitais? Schwarz (2006) não esboça resposta para essa pergunta. Podemos sugerir uma hipótese, considerando as características da revista *Nature*, que abrange todos os campos das ciências da Natureza e suas tecnologias. Assim, o público atingido não se constitui apenas de químicos quânticos, mas de especialistas em outras áreas que poderiam se interessar pelas possibilidades de interpretações qualitativas decorrentes das imagens dos orbitais.

Outro grupo de autores discute a suposta relação de correspondência entre essas imagens e os diagramas de orbitais presentes em livros didáticos. Shahbazian e Zahedi (2006) apontam que, aparentemente, o foco de Zuo e colaboradores (1999) era divulgar uma nova técnica experimental, baseada na combinação da difração de elétrons e de raios-X, para se determinar a densidade eletrônica em cristais. Contudo, no editorial da revista *Nature* (HUMPHREYS, 1999), destacou-se a afirmação de que as imagens dos orbitais d_z^2 apresentadas por Zuo e colaboradores são espantosamente semelhantes às presentes em livros didáticos de Química Geral. Segundo Wang e Schwarz (2000), essa afirmação sugere que os orbitais estejam na Natureza. Contudo, para Wang e Schwarz, as imagens exibidas no artigo da *Nature*, produzidas por computadores, remetem, em vez disso, aos métodos matemáticos utilizados para a descrição das condições de um determinado sistema em particular.

Wang e Schwarz (2000) distinguem entre *densidade orbital* ($|\Psi|^2$) e a respectiva *função orbital*: a primeira é uma função real e positiva em um espaço tridimensional; a segunda pode ter fases positivas e negativas, e até mesmo fases complexas. Wang e Schwarz (2000) salientam que ambas podem ser representadas por meio de gráficos de superfície de contorno, ou em duas dimensões por mapas de linhas de contorno. Diante disso, a densidade de carga determinada por Zuo e colaboradores (1999) não necessariamente apresenta uma relação direta com as imagens presentes nos livros didáticos, pois essas últimas podem ser provenientes tanto da função de onda quanto da densidade orbital.

Diante das ponderações de Wang e Schwarz (2000), Pessoa Jr. (2007) acrescenta que as *formas* dos orbitais, ou mais precisamente, os lobos dos orbitais, são dependentes das equações matemáticas utilizadas para produzi-los. Em linhas gerais, diferentes formas se originam nas representações gráficas se selecionamos, de um lado, a função de onda Ψ , e, do outro, a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 . Se utilizarmos a função de onda Ψ para representar, por exemplo, os orbitais p , obteremos lobos arredondados. Por outro lado, a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , gera formas de halteres distorcidos (alongados) para os lobos desses orbitais.

Por fim, Mulder (2010) se restringe somente às imagens de orbitais em livros didáticos, os quais, segundo ele, sugerem que orbitais são *entidades reais*. Essa compreensão é transmitida pelo duplo significado atribuído ao orbital que, além da função de onda, é amplamente concebida pelos químicos como uma região de densidade de probabilidade elevada ($\rho = |\Psi|^2$) de se encontrar elétrons. Esta última se refere, muitas vezes, às representações veiculadas em livros didáticos, como observaremos nos resultados e discussão desta dissertação. Essa ambiguidade quanto ao significado do orbital transmite uma compreensão equivocada em relação ao que seja um estado quântico: enquanto a primeira caracterização do orbital remete a um *estado quântico*, a segunda sugere que orbitais são *entidades*.

2.3.2.5. Orbitais existem? – uma resposta filosófica a essa questão

Até o momento, observamos que, de maneira geral, os autores analisados visam fornecer, explícita ou implicitamente, argumentos em favor de um dado estatuto ontológico para o orbital, ou seja: argumentos objetivando mostrar que os orbitais existem; ou que não existem. Por exemplo, Jenkins (2003) aponta que a rejeição à existência dos orbitais se ampara no âmbito empírico, não em posições metafísicas. Visto de outro modo, uma posição *a priori* sobre a existência ou não dos orbitais será julgada posteriormente pelos resultados experimentais.

Entretanto, um grupo de autores defende que a questão de orbitais existirem ou não é estritamente filosófica, resultando que ambas as possibilidades são legítimas, não havendo a *melhor* opção. Isto é, tanto ser um realista científico, quanto ser um antirrealista científico quanto à existência dos orbitais, seriam orientações filosóficas legítimas. Obviamente, os autores descritos até aqui também baseiam suas perspectivas em bases filosóficas, de maneira que desejamos destacar, por meio da discussão a seguir, são propostas mais *flexíveis* em relação à existência dos orbitais.

Ainda que considere plausível a existência dos orbitais, bem como a possibilidade de observá-los, Ostrovsky (2005) considera legítimo rejeitar a existência dos orbitais sobre fundamentos filosóficos. Desse modo, apesar de possuir um ponto de vista claro, esse autor afirma que ambas as possibilidades são legítimas quando amparamos nossa escolha sob o viés filosófico.

Aprofundando essa linha de argumentação, Pessoa Jr. (2007) afirma que podemos interpretar a Mecânica Quântica de diferentes maneiras, desde uma interpretação positivista, em que os orbitais são considerados apenas como constructos matemáticos, sem qualquer relação com a realidade, até interpretações realistas, em que orbitais se referem a entidades existentes no mundo. Portanto, “o significado das representações pictóricas de orbitais vai depender da nossa postura interpretativa” (PESSOA JR., 2007, p. 32). Assim, para Pessoa Jr. (2007), Eric Scerri (2001), por exemplo, adota uma postura interpretativa quanto ao estatuto ontológico do orbital, embora não explicita isso. Ao não explicitar que sua rejeição à existência de orbitais em espécies polieletrônicas se deve, dentre outros motivos, a uma postura interpretativa particular, Scerri (2001) sugere que uma única postura interpretativa seja possível e adequada. Pessoa Jr. (2007) esclarece que outras posturas interpretativas, além da exposta por Scerri (2001), são possíveis, sendo tão legítimas quanto aquela adotada por Scerri (2001).

De modo análogo a Pessoa Jr. (2007), Schwarz (2006) coloca como uma *preferência pessoal* interpretar a função de onda Ψ como um elemento deduzido da realidade, ou interpretá-la como um constructo matemático que reproduz a realidade tão exatamente quanto permitem as medições experimentais. A primeira possibilidade se constitui em uma postura interpretativa realista em relação ao orbital, enquanto que a segunda se constitui em uma postura antirrealista.

Pessoa Jr. (2007) e Schwarz (2006) defendem que diferentes posições filosóficas podem ser adotadas em relação ao conceito de orbital. A adoção de uma posição filosófica pressupõe que ela seja utilizada em todos os contextos para justificar a existência dos orbitais, se a posição adotada for realista, ou para rejeitar sua existência, se a posição adotada for antirrealista.

Crasnow (2000), por sua vez, propõe uma alternativa às posições filosóficas, denominada de *atitude*²⁶ *filosófica* em relação aos debates entre realistas e antirrealistas da ciência. Sua proposta é apoiada na plausibilidade de que não exista uma *solução global* para a questão de qual seja a interpretação correta da ciência, se a realista ou a antirrealista. Para exemplificar sua proposta, Crasnow (2000) recorre ao caso da existência ou não dos orbitais.

²⁶ No sentido de uma orientação metodológica.

Primeiramente, se consideramos que a Mecânica Quântica rejeita orbitais em espécies polieletrônicas devido ao fato de o momento angular dos elétrons individuais não comutarem com o hamiltoniano, tal reconhecimento contrastaria com o sucesso e a centralidade do modelo orbital na teoria e prática química. Como esclarece Crasnow (2000), um argumento comumente utilizado para justificar uma posição realista é o sucesso da ciência, de modo que, adotando a postura antirrealista, estaríamos rejeitando a existência de um conceito que claramente é bem sucedido na sua área de conhecimento.

Posto isso, enquanto no Ensino de Química ou em problemas particulares da pesquisa em Química, orbitais podem ser tratados como reais, em outros contextos, tais como na Mecânica Quântica e na química teórica (ou química computacional), interessadas principalmente nos aspectos teóricos, orbitais podem ser tratados de um modo antirrealista ou instrumentalista. Assim, Crasnow (2000) considera que, em diferentes contextos, diferentes *atitudes* filosóficas são apropriadas. A tomada de uma determinada atitude depende do que se deseja fazer com os orbitais, bem como da plausibilidade de se empregar uma visão realista ou antirrealista conforme o contexto. Essa perspectiva tem o intuito de explorar as implicações epistemológicas da teoria, entretanto, sem a exigência de compromissos ontológicos.

Assim, Crasnow (2000) distingue entre uma *posição filosófica* e uma *atitude filosófica*, a qual seria mais flexível do que a primeira, pois não implicaria em compromissos rígidos. Crasnow (2000) compreende uma posição filosófica como um compromisso global, isto é, só podemos ser realistas ou antirrealistas científicos²⁷. “Posições filosóficas são tradicionalmente defendidas com argumentos e elas são mantidas com base nesses argumentos” (CRASNOW, 2000, p. 130). Por consequência, ao adotarmos uma posição filosófica em relação ao debate entre realistas e antirrealistas científicos, os argumentos empregados para sustentar uma dada posição visam descrever uma característica essencial da ciência (abordagem global), independente do contexto. Por exemplo, a adoção de uma *posição realista* implicará que orbitais existam em todos os contextos citados anteriormente. Em contrapartida, uma *atitude filosófica* privilegia compromissos fracos, pois a adoção de uma dada atitude depende do momento, do propósito e do contexto: podemos ser realistas ao ensinar orbitais, e antirrealistas ao empregar orbitais em cálculos da química computacional.

Portanto, Crasnow (2000) sugere que posições filosóficas se referem às *crenças* dos cientistas em relação ao uso das teorias, enquanto que atitudes filosóficas se referem ao *comportamento* dos cientistas ao empregar a teoria em diferentes contextos.

²⁷ Crasnow (2000) explicita, em seu trabalho, que há uma diversidade tanto de realismos quanto de antirrealismos científicos, o que, contudo, não seria um problema para a sua proposta.

Em um primeiro momento, a proposta de Crasnow (2000) parece sugerir um pluralismo ontológico, tal como exposto por Labarca e Lombardi (2010) e, por consequência, estaria atrelada às discussões sobre o reducionismo da Química em relação à Física. Por exemplo, se consideramos que o orbital é meramente um dispositivo heurístico e que essa entidade não existe, tal como a Física nos diz, em contraposição ao estatuto ontológico atribuído pela Química, a Física seria tomada como a ciência verdadeira e a Química seria reduzida a ela. Segundo Crasnow (2000), todas essas suposições são provenientes de uma *posição filosófica* sobre a natureza da ciência. Tais problemas são suprimidos se adotamos “uma atitude ou uma descrição de como os cientistas ou comunidade de cientistas (se estivermos aptos a generalizar) estão empregando atualmente uma teoria” (CRASNOW, 2000, p. 130). Além disso, Crasnow (2000) aponta que a grande convergência observada entre Química e Física se dá por essas descreverem um único e mesmo mundo, contestando, assim, o pluralismo ontológico de Labarca e Lombardi (2010).

Considerando a repercussão que a discussão sobre o estatuto ontológico e epistemológico do conceito de orbital causou na comunidade de químicos, físicos e filósofos da Química, a presente pesquisa visa investigar como o conceito de orbital é apresentado em livros de Química Geral dirigidos para o Ensino Superior. Uma breve discussão sobre livros didáticos será apresentada na próxima seção.

CAPÍTULO 3 – LIVROS DIDÁTICOS

3.1. Livros didáticos para o Ensino Superior: objetos ainda pouco investigados

Esta pesquisa visa investigar livros didáticos (LD)²⁸ voltados para o Ensino de Química Geral no Ensino Superior. Os livros didáticos participam da formação de futuros cientistas (químicos) e professores, tanto do Ensino Médio (EM) quanto do Ensino Superior (ES). Como ressalta Kuhn (2009), os conhecimentos científicos dos profissionais estão baseados, consideravelmente, nos livros didáticos do ES e em outras produções derivadas desses.

A literatura especializada apresenta uma diversidade de trabalhos investigando livros didáticos de Química para o Ensino Médio, focando, de maneira geral, a análise de uma questão específica, tais como: a contextualização do conhecimento químico (WARTHA & FALJONI-ALÁRIO, 2005; ABREU, GOMES & LOPES, 2005); a apresentação de um conceito químico ou algum conceito relacionado à Química (LOPES, 1994; MENDONÇA, CAMPO & JÓFILI, 2004; CANZIAN & MAXIMIANO, 2010) as concepções de ciência transmitidas (MARTORANO & MARCONDES, 2009; CAMPOS & CACHAPUZ, 1997); a apresentação da História da Química (VIDAL, CHELONI & PORTO, 2007); representações em Química (LEMES, SOUZA & CARDOSO, 2010). Contudo, como indicam Souza, Mate e Porto (2009), os livros didáticos de Química para o ES raramente são objetos de pesquisa. Alguns trabalhos com essa temática são o de Oliveira e colaboradores (2009), no qual os autores investigam a apresentação do eletrodo de hidrogênio em livros de Química Geral e Físico-Química do ES; e o de Cunha (2003), em que o autor investiga a ordem de estabilidade de alcenos apresentada em livros de Química orgânica do ES.

Diante desse levantamento, ainda que breve, constata-se a carência de investigações em livros didáticos para o Ensino Superior, especialmente aquelas voltadas a analisar aspectos ontológicos e epistemológicos de conceitos químicos, bem como as implicações desses aspectos no processo de ensino-aprendizagem.

3.2. Características e objetivos (explícitos e implícitos) dos livros didáticos

²⁸ Como descrevem Souza, Mate e Porto (2009), apesar de o termo *livro didático* (LD) ser pouco utilizado no contexto do Ensino Superior, pode-se considerar que “livros escolares (ou livros didáticos) são todas as obras cuja intenção original é explicitamente voltada para o uso pedagógico e esta intenção é manifesta pelo autor ou editor” (Guia LIVRES, 2005, p.7. In: Bezerra; Bittencourt, 2006, p. 3092 *apud* SOUZA, MATE & PORTO, 2009).

Thomas Kuhn (2009) denomina os livros didáticos como manuais científicos, e considera que estes dizem respeito a “um corpo já articulado de problemas, dados e teorias, e muito frequentemente ao conjunto particular de paradigmas aceitos pela comunidade científica na época em que esses textos foram escritos” (ibid., p. 176). Além disso, como ressalta Kuhn (2009), visam comunicar o vocabulário e a sintaxe de uma linguagem científica contemporânea. Outro ponto importante é que os manuais científicos são escritos por membros da comunidade científica, sendo específicos para cada ciência, ou seja, manuais de Física são escritos pela comunidade dos físicos, manuais de Química são escritos pela comunidade de químicos, etc.

Segundo Kuhn, os manuais científicos apresentam “o resultado estável das revoluções passadas”²⁹ e, portanto, não precisam proporcionar “informações autênticas a respeito do modo pelo qual essas bases foram inicialmente reconhecidas e posteriormente adotadas pela profissão”³⁰ (KUHN, 2009, p.176, grifo nosso). Isso resulta, segundo Kuhn (2009), em versões deturpadas da História da Ciência nos manuais científicos. Embora não seja objetivo desta dissertação, destacamos que os livros didáticos de Química, excetuando-se alguns poucos tópicos, tais como modelos atômicos e Mecânica Quântica, desenvolvem teorias e conceitos químicos sem uma justificativa histórica para o reconhecimento e posterior adoção dessas ideias pelos químicos. No entanto, mesmo aqueles poucos tópicos padecem da visão deturpada da história da ciência mencionada por Kuhn (2009).

O livro didático, tanto do ES quanto do EM, transmite, também, aos professores e alunos, explícita ou implicitamente, concepções sobre a ciência e os cientistas (CAMPOS & CACHAPUZ, 1997). Tais concepções podem ser provenientes, para citar alguns exemplos, da forma de apresentação dos conceitos químicos nos livros didáticos (MARTORANO & MARCONDES, 2009) e, quando presente, da História da Química apresentada (VIDAL, CHELONI & PORTO, 2007).

Considerando o que foi exposto acima, esta pesquisa visa investigar livros didáticos de Química Geral do ES produzidos no século XX no que diz respeito à apresentação do conceito de orbital, vinculando-se à linha de pesquisa que estuda a evolução histórica dos livros didáticos (CHOPPIN, 2004). A análise histórica dos livros didáticos indica que os mesmos podem assumir quatro funções principais, que variam conforme o ambiente sociocultural, a época, as disciplinas, os níveis de ensino, os métodos e a forma de utilização:

²⁹ A identificação de revoluções na Química, tais como Kuhn identificou para a Física, é difícil, e talvez, incompatível com o peculiar desenvolvimento da Química, tal como descrito em mais detalhes na seção 1.3.3.

³⁰ A não necessidade de informações *autênticas* a que Kuhn (2009) se refere diz respeito à história da disciplina, salientando apenas os pontos que contribuem de alguma forma com o paradigma atual, ou seja, uma deturpação da história da disciplina.

- i) Função Referencial [...]. O livro didático é então apenas a fiel tradução do programa³¹ ou quando se exerce o livre jogo da concorrência, uma de suas possíveis interpretações. Mas, em todo caso, ele constitui o suporte privilegiado dos conteúdos educativos, o depositário dos conhecimentos, técnicas ou habilidades que um grupo social acredita que seja necessário transmitir às novas gerações;
- ii) Função Instrumental [...] põe em prática métodos de aprendizagem, propõe exercícios ou atividades [...];
- iii) Função ideológica e cultural [...] um dos vetores essenciais da língua, da cultura e dos valores da classe dirigente. Instrumento privilegiado na construção de identidades [...];
- iv) Função documental [...] pode fornecer, sem que sua leitura seja dirigida, um conjunto de documentos, textuais ou icônicos, cuja observação ou confrontação podem vir a desenvolver o espírito crítico do aluno³². (CHOPPIN, 2004, p. 553)

Até aqui discutimos brevemente os objetivos e aspectos mais amplos do livro didático. Como dito anteriormente, os livros visam comunicar a linguagem de uma dada comunidade científica. No que diz respeito ao objeto desta pesquisa, isto é, livros de Química Geral voltados para o Ensino Superior, estes comunicam a linguagem particular dessa ciência, tendo em vista a aprendizagem das teorias, leis, modelos e conceitos químicos. Tais discussões são amparadas por equações, diagramas, imagens, etc., sendo que cada um desses elementos apresenta características próprias. Assim, no próximo tópico, discutiremos a natureza das diferentes formas de representação observadas nos livros didáticos, apresentando o referencial da Semiótica Química.

³¹ Como ressalta Choppin (2004), se houver currículo ou programa de ensino a ser seguido.

³² Segundo Choppin (2004), esta função é recente, principalmente se considerarmos que a literatura didática começou a fazer parte da instituição escolar européia a partir de 1760, e não é universal.

CAPÍTULO 4 – SEMIÓTICA QUÍMICA

4.1. Representações: construção e divulgação do conhecimento químico

A ciência Química é caracterizada pela produção e transmissão de formas peculiares de representação de seus objetos, fenômenos e processos de estudo, que podem se referir aos mundos macroscópico ou submicroscópico (GOIS & GIORDAN; 2007; SOUZA & PORTO, 2010; SOUZA & PORTO, 2011). Deste modo, as representações permitem ao químico, por exemplo, *manipular representações* de entidades (átomos, íons, moléculas, etc.) no papel e em *softwares* de simulação, e, por meio destas entidades, *fazer previsões* de fenômenos no nível macroscópico. Assim, no âmbito do Ensino de Química, as representações são centrais para a construção do conhecimento químico, bem como para a sua divulgação (SOUZA, 2012).

Os livros didáticos de Química Geral apresentam imagens, diagramas e outros recursos visuais com o intuito de representar e manipular simbolicamente o conceito de orbital, que se constitui no objeto de estudo deste trabalho. Por isso, é necessário um referencial teórico particular para analisar as representações dos orbitais encontradas nos livros didáticos. Para orientar essa análise, selecionamos a teoria semiótica desenvolvida por Charles S. Peirce.

4.2. Semiótica: um referencial para se analisar as representações da Química

4.2.1. Semiótica: um campo que investiga linguagens verbais e não-verbais

A palavra *semiótica* se origina da raiz grega *semeion*, compreendida como *signo*. Ou seja, Semiótica é a ciência que estuda os signos. Os signos remetem a todas as formas de linguagem possíveis, isto é, às linguagens verbais (oral e escrita) e às linguagens não-verbais. Assim, a Semiótica é a ciência geral de todas as linguagens e “tem por objetivo o exame dos modos de constituição de todo e qualquer fenômeno como fenômeno de produção de significação e de sentido” (SANTAELLA, 1994, p. 13). Outra compreensão equivalente para a Semiótica é o de uma “ciência dos processos significativos (semiose), dos signos linguísticos e das linguagens” (NÖTH, 2005 *apud* GOIS & GIORDAN, 2007, p. 35).

A linguagem verbal nos é tão íntima, por conta do uso da nossa língua materna desde a infância (primeiramente na forma oral), que a importância da linguagem não-verbal

no ato de comunicação passa despercebida para nós. Entretanto, Santaella (1994) descreve que é

tal a distração que a aparente dominância da língua provoca em nós que, na maior parte das vezes, não chegamos a tomar consciência de que o nosso estar-no-mundo, como indivíduos sociais que somos, é mediado por uma rede intrincada e plural de linguagem, isto é, que nos comunicamos também através da leitura e/ou produção de formas, volumes, massas, interações de forças, movimentos; que somos também leitores e/ou produtores de dimensões e direções de linhas, traços, cores... Enfim, também nos comunicamos e nos orientamos através de imagens, gráficos, sinais, setas, números, luzes... Através de objetos, sons musicais, gestos, expressões, cheiro e tato, através do olhar, do sentir e do apalpar. (SANTAELLA, 1994, p. 14, grifo nosso)

A linguagem não-verbal é de interesse para esta pesquisa, pois os próprios exemplos grifados na citação anterior são utilizados pelos livros de Química Geral do século XX para comunicar significados a respeito do conceito de orbital. Obviamente, não se está excluindo aqui a comunicação feita pelos livros através da linguagem escrita, mas enfatizando a importância da linguagem não-verbal e a necessidade do referencial proveniente da Semiótica para analisá-la.

Os livros de Química Geral e, em um âmbito mais amplo, os manuais científicos, visam transmitir, tendo em vista a perspectiva kuhniana, os compromissos ontológicos, epistemológicos e axiológicos, ainda que não explicitados desse modo, de uma dada comunidade científica. A transmissão de tais compromissos se dá através de linguagens (verbais e não-verbais). Santaella (1994) tece as seguintes considerações em relação à transmissão de linguagens por um dado grupo social:

Considerando-se que todo fenômeno de cultura só funciona culturalmente porque é também um fenômeno de comunicação, e considerando-se que esses fenômenos só comunicam porque se estruturam como linguagem, pode-se concluir que todo e qualquer fato cultural, toda e qualquer atividade ou prática social constituem-se como práticas significantes, isto é, práticas de produção de linguagem e de sentido. (SANTAELLA, 1994, p. 11, grifo nosso)

4.2.2. A semiótica peirceana

A teoria semiótica é ampla e exhibe inúmeras possibilidades de abordagens. Neste trabalho, nos guiaremos pela teoria semiótica desenvolvida por Charles Sanders Peirce (1839-1914), um dos pioneiros das teorias semióticas modernas. Peirce, químico de formação, mas também matemático, físico e astrônomo, para citar apenas alguns de seus interesses, concebeu a semiótica como parte de um sistema filosófico mais amplo: a lógica das ciências. Todavia, nas discussões posteriores enfocaremos, essencialmente, a fenomenologia e a teoria geral dos signos desenvolvidas por Peirce.

4.2.2.1. Três categorias universais de apreensão e tradução da realidade: *primeiridade*, *secundidade* e *terceiridade*

Segundo Peirce (*apud* SANTAELLA, 1994), a análise fenomenológica divide em três categorias universais a apreensão e tradução de tudo o que aparece à nossa consciência³³: *Primeiridade*; *Secundidade*; e *Terceiridade*. Estas são descritas do seguinte modo:

[A Primeiridade] é a categoria da presença imediata, do sentimento irrefletido, da mera possibilidade, da liberdade, da imediatez, da qualidade não diferenciada e da independência. [...] [A Secundidade] é a categoria do confronto, da experiência no tempo e no espaço, do fático, da realidade, da surpresa [...]. [A Terceiridade] é a categoria da mediação, do hábito, da lembrança, da continuidade, da síntese, da comunicação e da semiose, da representação ou dos signos. (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 143)

Todos os fenômenos da Natureza, na perspectiva de Peirce, são redutíveis às três categorias acima. Salientamos que essas categorias fenomenológicas não são independentes, pois,

apesar de os signos pertencerem à categoria da *terceiridade*, já que eles unem um primeiro, a saber, o veículo do signo (*representamen*), a um segundo, o objeto representado no signo, em um terceiro, a consciência interpretativa, os aspectos da *primeiridade* e da *secundidade* podem, em certos casos, predominar, de maneiras distintas, no signo (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 143).

Em relação à *terceiridade* de Peirce, Santaella (1994) acrescenta que a ideia mais simples em torno da mesma é a de produzir um *signo* ou *representação*. Por consequência,

[...] o signo é uma coisa que representa uma outra coisa: seu objeto. Ele só pode funcionar como signo se carregar esse poder de representar, substituir uma outra coisa diferente dele. Ora, o signo não é o objeto. Ele apenas está no lugar do objeto. Portanto, ele só pode representar esse objeto de um certo modo e numa certa capacidade. (SANTAELLA, 1994, p. 58, grifo nosso)

4.2.2.2. A construção de significado por meio da tríade: *signo*, *objeto* e *interpretante*

De acordo com Santaella (2008), o processo de construção de significados envolve sempre três componentes: *signo*, *objeto* e *interpretante*³⁴. Nas palavras de Peirce, “o signo é um veículo que comunica à mente algo do exterior. Aquilo em cujo lugar o signo está é denominado seu objeto; aquilo que o signo transmite, seu significado (*meaning*); e a ideia que ele provoca, seu interpretante” (PEIRCE *apud* SANTAELLA, 2008, p. 28). Em resumo: o signo é determinado pelo objeto; e o interpretante, pelo signo. Desse modo, o signo atua

³³ Santaella (1994) aponta que, para Peirce, a consciência não se refere, unicamente, à razão. Esta última compõe a consciência, que vai, entretanto, além da razão.

³⁴ Para Peirce, interpretante não diz respeito ao intérprete do signo, mas ao processo relacional que se gera na mente do intérprete (SANTAELLA, 2000).

como mediador entre objeto e interpretante. Essa característica faz com que vislumbremos os três elementos citados como uma tríade.

Detendo-nos um pouco mais sobre o objeto representado pelo signo, Santaella e Nöth (2008) descrevem que esse “pode ser qualquer coisa existente, perceptível, apenas imaginável, ou mesmo não suscetível de ser imaginada” (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 159). Portanto, o objeto “pode ser qualquer coisa existente conhecida, ou que se acredita ter existido, ou que se espera existir, ou uma coleção de tais coisas” (ibid., p. 160). Neste trabalho, visamos investigar qual o estatuto ontológico do orbital em livros didáticos. Esse é comunicado através de uma diversidade de signos, cada qual visando salientar um ou mais aspectos desse objeto. Assim, para caracterizar o estatuto ontológico do orbital, há que se observar qual a compreensão transmitida pelos signos em relação ao objeto que representam. Isto é: um signo pode se referir ao orbital como um objeto abstrato, ou como um objeto de fato existente na Natureza.

O processo de significação (semiose), ilustrado pela tríade signo, objeto e interpretante, ocorre ininterruptamente, pois o signo representa o objeto apenas em certos aspectos. Dessa maneira, “o signo estará, nessa medida, sempre em falta com o objeto. Daí sua incompletude e consequente impotência, sua tendência a se desenvolver num interpretante onde busca se completar” (SANTAELLA, 2008, p. 30), ainda que a completude seja inatingível. Essa característica do signo de, a partir de si, gerar novos signos, evidencia que esse sempre é incompleto.

A incompletude de qualquer signo gera, como consequência, a mútua complementaridade dos signos. Tendo em vista um mesmo objeto ou fenômeno, podemos representá-lo através de diversos signos, cada qual privilegiando certos aspectos em detrimento de outros. Por exemplo, a fórmula molecular da água, H_2O , nos indica a composição da molécula, a qual contém dois átomos de hidrogênio e um átomo de oxigênio. Contudo, nada nos diz, por exemplo, sobre como esses três átomos estão dispostos no espaço. Tal informação é privilegiada por outro signo, a saber, a fórmula estrutural da molécula da água:

Figura 2 – Fórmula estrutural da água

A fórmula estrutural proporciona o arranjo espacial aproximado dos átomos na molécula. No referido exemplo, tal arranjo corresponde a uma geometria angular. Apesar da composição da água ser facilmente determinada através da fórmula estrutural, em moléculas contendo muitos átomos, tal prática pode despendar muito tempo. Assim, nesses

casos, se estamos interessados, por exemplo, em determinar a massa molecular, recorreremos diretamente à fórmula molecular. Esses dois exemplos evidenciam a complementaridade dos signos que, em conjunto, ampliam o espectro de informações, ou, nos termos de Peirce, geram novos interpretantes sobre um mesmo objeto.

Como destacado por Souza (2012), a mútua complementaridade dos signos faz com que as *habilidades de manejo e compreensão dos diversos signos* empregados sejam cruciais para os que constroem o conhecimento químico e, principalmente, para os que ensinam esse conhecimento. Assim, há que se discutir os limites e possibilidades de um dado signo, tal como feito anteriormente para os dois signos referentes à molécula de água, onde cada qual visa salientar *complementarmente* um ou mais aspectos do objeto em questão.

4.2.2.3. Uma tricotomia relacional entre signo e objeto: ícone, índice e símbolo

Peirce classificou os signos segundo três tricotomias. A primeira tricotomia se refere ao signo em si mesmo, e se divide em quali-signo, sin-signo e legi-signo. A segunda tricotomia diz respeito à relação do signo com o objeto, e se divide em ícone, índice e símbolo. A terceira tricotomia diz respeito à relação do signo com o interpretante, e se divide em rema, dicente e argumento. As subdivisões das tríades levam em conta as variações das categorias de primeiridade, secundidade e terceiridade. Santaella (2008) esclarece que as tricotomias “não funcionam como categorias separadas de coisas excludentes, mas como modos coordenados e mutuamente compatíveis pelos quais algo pode ser identificado semioticamente” (ibid., p. 96). Não nos deteremos nos detalhes da primeira e da terceira tricotomias: restringir-nos-emos à segunda tricotomia, relação do signo com o objeto, que se mostra mais adequada ao escopo deste trabalho.

A primeira categoria de signo, tendo em vista sua relação com o objeto, é o ícone. Esse foi dividido por Peirce em: ícone puro e signos icônicos ou hipoícones. Deter-nos-emos apenas neste último, visto que, diferentemente do ícone puro, os hipoícones “agem propriamente como signos porque representam algo” (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 62). Hipoícones apresentam uma relação de similaridade com o seu objeto (aquele que é representado) e podem ser divididos em imagem, diagrama e metáfora. Santaella (1994) descreve abaixo as características das três categorias de hipoícones:

As imagens propriamente ditas participam de simples qualidades ou Primeiras Primeiridades. [...] As imagens representam seus objetos porque apresentam similaridades ao nível de qualidade.
[...] Os diagramas representam as relações – principalmente relações diádicas ou relações assim consideradas – das partes de uma coisa, utilizando-se de relações análogas em suas partes. Assim sendo, os

diagramas representam por similaridade nas relações internas entre signo e objeto (gráficos de qualquer espécie, por exemplo).

[...] As metáforas representam o caráter representativo de um signo, traçando-lhe um paralelismo com algo diverso. (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 52)

As imagens, quando em si mesmas, isto é, sem legendas ou rótulos, visam representar por similaridades na aparência. As qualidades representadas pelas imagens podem ser, por exemplo, a forma, a cor, a textura, o volume e o movimento. Diferentemente das imagens, os diagramas não são aptos a transmitir, por si, similaridades no nível da aparência com o objeto ou fenômeno representado, de modo que, ao olharmos um diagrama, não nos lembramos do objeto. A semelhança entre objeto e signo presente nos diagramas se dá nas “relações entre as partes dos signos e as relações entre as partes do objeto a que o signo se refere” (SANTAELLA, 2008, p. 120). Por fim, as metáforas têm o intuito de representar um objeto muito diferente delas e, desse modo, necessitam de uma forte mentalização e acionamento de significados construídos anteriormente pelo intérprete. Visto isso, conclui-se que “a imagem é uma similaridade na aparência, o diagrama, nas relações, e a metáfora, no significado” (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 62).

Para esta pesquisa, os signos icônicos imagem e diagrama são de suma importância, visto que são utilizados pelos livros didáticos para representar aspectos do orbital. O primeiro é identificado nos livros didáticos através das imagens dos orbitais que visam transmitir qualidades do objeto representado. O segundo, por sua vez, se refere aos diagramas de orbitais, particularmente aos diagramas de energia de orbitais, que relacionam seus diferentes níveis de energia.

A segunda categoria de signo, tendo em vista sua relação com o objeto, é a indexical. Esta categoria de signo é identificada “quando a relação com seu objeto consiste numa correspondência de fato ou relação existencial” (SANTAELLA, 2008, p. 21). São exemplos de índices: termômetros; cataventos; relógios; barômetros; bússolas; a estrela polar; fitas métricas; o furo de uma bala; fotografias; uma batida na porta; todo o tipo de equipamentos, aparelhos e sensores de captação e registro do som e da imagem (tanto em nível microscópico quanto macroscópico).

Como podemos observar, os signos indexicais abrangem uma ampla gama de fatos, coisas, fenômenos e processos. Apesar disso, todos têm em comum uma conexão real entre o signo e o seu objeto. Santaella (2008) indica que a principal característica do índice é a de chamar a atenção do intérprete, visando alertá-lo e conduzi-lo diretamente para o seu objeto. Para exemplificar, apresentamos abaixo a descrição de Peirce para alguns dos índices citados no parágrafo anterior:

Um barômetro a marcar a pressão baixa e ar úmido é índice de chuva, isto é, supomos que as forças da natureza estabelecem uma conexão provável

entre o barômetro, que marca pressão baixa, com o ar úmido e a chuva iminente. Um catavento é um índice da direção do vento, dado que, em primeiro lugar, ele realmente assume a mesma direção do vento, de tal modo que há uma conexão real entre ambos e, em segundo lugar, somos constituídos de tal forma que, quando vemos um catavento, apontando numa certa direção, nossa atenção é atraída para essa direção e, quando vemos o catavento girando com o vento, somos forçados, por uma lei do espírito, a pensar que essa direção tem uma relação com o vento. (PEIRCE p. 2286 *apud* SANTAELLA, 2008, p. 125)

No âmbito da Química, os signos indexicais são exemplificados, por exemplo, pelos espectros. Esses são produzidos através de espectrofotômetros, equipamentos que determinam a interação entre luz e matéria, particularmente a absorção ou emissão de luz pela matéria. Por exemplo, a espectroscopia vibracional, referente à absorção ou emissão de luz no infravermelho, produz espectros, signos indexicais, aos quais nos permitem indicar as conectividades dos átomos na molécula. Através da avaliação das bandas presentes nesses espectros, os químicos são conduzidos até a molécula investigada pela referida técnica. Assim, há uma conexão real entre signo, exemplificados pelo espectro da molécula, e o objeto aos quais esses signos remetem, nesse caso, a molécula investigada.

Tendo em vista o poder de referencialidade do *índice*, levanta-se a questão de qual é a referencialidade do *ícone*: a que o ícone se refere? A que ele se aplica? O que ele denota? O que ele representa? (SANTAELLA, 2010). O ícone representa o seu objeto por apresentar qualidades em comum com ele; assim, a capacidade referencial do ícone reside em *poder ter* alguma semelhança com as qualidades do seu objeto. Essa característica do ícone, de potencialidade, expressa pelo *poder ter*, revela um grau de ambiguidade desse tipo de signo. Diferentemente do índice, em que a referencialidade é direta e sem ambiguidades, pois *indica* o objeto, a referencialidade do ícone se apresenta como uma *sugestão*.

A terceira categoria de signo, tendo em vista a sua relação com o objeto, é o símbolo. Santaella (2008) o descreve do seguinte modo:

O símbolo é um signo cuja virtude está na generalidade da lei, regra, hábito ou convenção de que ele é portador e a função como signo dependerá precisamente dessa lei ou regra que determinará seu interpretante. (SANTAELLA, 2008, p. 132)

Santaella (1994) complementa a descrição acima afirmando que “o símbolo não é uma coisa singular, mas um tipo geral. E aquilo que ele representa também não é um individual, mas um geral” (ibid., p. 67). Por exemplo, quando consideramos o conceito de homem, este não produz em nossa mente um homem em particular, mas, todos os homens que possam existir, tal como na denominação biológica de espécie humana. Neste caso, o signo homem se refere a um coletivo (SANTAELLA, 2008).

Santaella e Nöth (2008) relatam que essa descrição de Peirce não é nova: pelo contrário, o termo *símbolo*, em grego, se referia à celebração de um contrato ou convenção. Posto isso, os autores apontam as limitações intrínsecas do símbolo:

Por si mesmo o símbolo não é capaz de identificar as coisas às quais se refere ou é aplicável, isto é, não nos faz ver uma estrela no céu, não nos mostra um pássaro voando, nem celebra um casamento diante de nossos olhos, mas supõe que somos capazes de imaginar tais coisas, tendo a elas associado a palavra (PEIRCE, p. 2.298 *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 63)

As palavras de um sistema linguístico são exemplos de símbolos, pois se relacionam com seus objetos simbolicamente através de convenções sociais-culturais-históricas recebidas *a priori* pelos intérpretes, isto é, as palavras só se tornam signos simbólicos quando os intérpretes são levados pelas convenções a interpretar de certo modo o significado de uma palavra.

No caso desta pesquisa, nas discussões sobre os níveis de energia dos orbitais, nota-se a introdução de símbolos, geralmente *traços horizontais* (—), acompanhados por letras e números, como, por exemplo, 1s, para designar os orbitais. Estes são comumente identificados pelos livros como *notação de orbitais* e previamente esclarecidos, ainda que não nestes termos, como representações simbólicas dos orbitais. No caso do exemplo citado, o símbolo 1s — é lido como o primeiro nível de energia do átomo ou íon em questão e, além disso, diz respeito a um orbital do tipo s.

Tendo apresentado anteriormente as três modalidades mais gerais de signos de um modo isolado, há que se ressaltar que um signo “vem sempre com misturas de caracteres icônicos, indiciais e simbólicos. Nenhum signo atual aparece em estado puro” (SANTAELLA, 2008, p. 27). Santaella e Nöth (2008) elucidam a afirmação anterior através do seguinte exemplo:

A afirmação de que a imagem é sempre e meramente ícone já é relativamente enganadora; a de que a palavra é pura e simplesmente símbolo é decididamente equivocada. Os níveis de convencionalidade, que estão presentes, em maior ou menor medida, nas imagens, correspondem ao seu caráter simbólico, além de que há imagens alegóricas que figuram simbolicamente aquilo que denotam. Assim, também há necessariamente imagem no símbolo, pois sem a imagem o símbolo não pode significar. (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 63)

Esta última consideração deve ser levada em conta para que não tomemos as categorias de signos como puras. Por exemplo, no âmbito desta pesquisa, os diagramas de energia de orbitais têm certo caráter icônico, mas, também, um caráter simbólico saliente, pois se convencionou, nos livros de Química Geral, que os traços horizontais, acompanhados por letras e números, devem ser entendidos como representando orbitais, ou níveis de energia de orbitais. O tratamento isolado dos signos, expresso neste tópico, pode auxiliar na

categorização dos signos presentes nos livros didáticos, pois é possível inferir que um ou outro caráter, isto é, icônico, indicial ou simbólico, seja predominante em determinado signo.

4.3. O olhar semiótico sobre os livros didáticos

4.3.1. As imagens dos livros didáticos: função e organização

Em livros didáticos, as imagens, mas também os gráficos, diagramas, etc., são acompanhadas da linguagem verbal escrita, presente na legenda e/ou no corpo do texto. A relação entre texto e imagem pode ser caracterizada pelo fato de a imagem ilustrar o texto ou, o oposto, o texto esclarecer a imagem (SANTAELLA & NÖTH, 2008). Em qualquer uma das possibilidades, a imagem por si só não parece ser suficiente sem o texto. A este respeito, Santaella e Nöth afirmam que “a abertura interpretativa da imagem é modificada, especificada, mas também generalizada pelas mensagens do contexto imagético” (*ibid.*).

Kalverkämper (1993, *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008) descreve as formas em que a relação texto-imagem pode ser caracterizada:

(1) a imagem é inferior ao texto e simplesmente complementa, sendo, portanto, redundante. *Ilustrações* em livros preenchem ocasionalmente essa função, quando, por exemplo, existe o mesmo livro em uma outra edição sem ilustrações. (2) A imagem é superior ao texto e, portanto, o domina, já que ela é mais informativa do que ele. *Exemplificações* enciclopédicas são frequentemente deste tipo: sem a imagem, uma concepção do objeto é muito difícil de ser obtida. (3) Imagem e texto têm a mesma importância. A imagem é, nesse caso, integrada ao texto. (KALVERKÄMPER, 1993, p. 27 *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 54)

Moles (1978, p. 22 *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008) aponta que “a legenda comenta a imagem que, sozinha, não é totalmente entendida. A imagem ou a figura comenta o texto e, em alguns casos, a imagem comenta sua própria legenda.” (*ibid.*, p. 55). Outro ponto se refere às referências recíprocas entre texto e imagem, denominadas relações de referência indexicais, que podem ser divididas, de maneira geral, em *ancoragem* e *relais*:

[Na relação de ancoragem] o texto dirige o leitor através dos significados da imagem e o leva a considerar alguns deles e a deixar de lado outros. [...] A imagem dirige o leitor a um significado escolhido antecipadamente. [Na relação de relais] o texto e a imagem se encontram numa relação complementar. As palavras, assim como as imagens, são fragmentos de um sintagma mais geral e a unidade da mensagem se realiza em um nível mais avançado. (BARTHES, 1964, p. 38-41 *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 55)

Além das funções descritas acima, acrescentamos as de *denominação* ou *etiquetamento*, isto é, a palavra indica a coisa mostrada na imagem (SANTAELLA & NÖTH, 2008).

A disposição espacial, ou, mais precisamente, a expressão visual entre imagem e texto, pode ocorrer de diversas formas. Kibédi-Varga (1989 *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008) enumera tais possibilidades:

(1) *Coexistência*: palavra e escritura aparecem numa moldura comum; a palavra está inscrita na imagem. (2) *Interferência*: a palavra escrita e a imagem estão separadas uma da outra espacialmente, mas aparecem na mesma página (por exemplo, ilustrações de textos com comentários textuais). (3) *Co-referência*: a palavra e imagem aparecem na mesma página, mas se referem ao mundo uma independente da outra. (KIBÉDI-VARGA, 1989, p. 39-42 *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 56)

4.3.2. Natureza semiótica das imagens

Quanto à natureza, as imagens podem ser: pré-fotográficas; fotográficas; e pós-fotográficas. Tais categorias se referem à forma de produção das imagens, podendo ser consideradas como paradigmas (SANTAELLA & NÖTH, 2008).

O paradigma pré-fotográfico se refere a “todas as imagens que são produzidas artesanalmente, quer dizer, imagens feitas à mão, dependendo, portanto, fundamentalmente da habilidade manual de um indivíduo para plasmar o visível, a imaginação visual e mesmo o invisível numa forma bi ou tridimensional” (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 157). Essas imagens abrangem desenhos, pinturas e gravuras.

O paradigma fotográfico se caracteriza por imagens produzidas “por conexão dinâmica e captação física de fragmentos do mundo visível, isto é, imagens que dependem de uma máquina de registro, implicando necessariamente a presença de objetos reais preexistentes” (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 157).

O paradigma pós-fotográfico se refere às imagens geradas por computador. Essas imagens são determinadas pelo trinômio cérebro³⁵-programa-expressão sensível, e se caracterizam por não mais dependerem de quaisquer formas de registro do observável³⁶. Essa característica das imagens sintéticas tem como consequência o fato de que, “mesmo quando buscam imitar a realidade visível, não são mais figuras de registro, mas simulações, produzidas pelo cérebro e mediadas por programas numéricos” (SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 95). Tais imagens são, também, representações, ou, mais precisamente, uma série

³⁵ Essa designação dos autores reduz o ser humano, que alimenta o computador com dados, ao seu cérebro.

³⁶ Santaella e Nöth tomam como referência de comparação as fotografias, que são determinadas pelo trinômio olho-mediação-registro.

de representações, provenientes de equações algébricas processadas pelos computadores. Couchot argumenta que

o ponto de partida da imagem sintética é uma abstração, não existindo a presença do real empírico em nenhum momento do processo. Daí ela ser uma imagem que busca simular o real em toda sua complexidade, segundo leis racionais que o descrevem ou explicam, que busca recriar uma realidade virtual autônoma, em toda sua profundidade estrutural e funcional. (COUCHOT *apud* SANTAELLA & NÖTH, 2008, p. 167)

Em suma, a primeira categoria se caracteriza por processos *artesanais de criação* da imagem, a segunda por *processos automáticos* de captação da imagem, e a terceira por processos *matemáticos de geração* da imagem (SANTAELLA & NÖTH, 2008). A natureza de tais imagens e a relação predominante das mesmas com o mundo é, respectivamente, de símbolo, índice e ícone. Esta última consideração de Santaella e Nöth (2008) nos faz lembrar que as imagens dos orbitais publicadas no caso da *Nature*, principalmente as que foram divulgadas para o grande público, se aproximam da afirmação de que orbitais foram *fotografados*. Como vimos, isso sugere a presença de orbitais na natureza, pois o registro fotográfico implica a preexistência do objeto.

Visto isso, as seguintes questões podem ser formuladas quanto à possível natureza das imagens dos orbitais que são expostas pelos livros didáticos de Química Geral: essas imagens são expostas como desenhos ou gravuras, transmitindo, assim, a compreensão de que foram concebidas via imaginação (paradigma pré-fotográfico)? Tais imagens são apresentadas como fotografias, implicando, por consequência, a preexistência desses objetos na realidade (paradigma fotográfico)? Ou, ainda, são exibidas como imagens geradas por computador, especificamente, *softwares*, os quais processam equações matemáticas para a produção de tais imagens (paradigma pós-fotográfico)?

Tais questões auxiliaram a investigação da natureza das imagens dos orbitais ilustradas em livros didáticos de Química Geral ao longo do século XX, bem como a discussão do estatuto ontológico dos orbitais sugerido por essas ilustrações.

CAPÍTULO 5 – METODOLOGIA

5.1. Seleção dos livros didáticos de Química Geral para o Ensino Superior

Souza e Porto (2012) fizeram um levantamento de livros didáticos de Química Geral utilizados no Ensino Superior durante o século XX no Brasil. O levantamento focou em três bases de dados: os catálogos das bibliotecas da Universidade de São Paulo (USP), da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), e do *site* Estante Virtual³⁷, que reúne os acervos de vários sebos brasileiros. As duas Universidades foram escolhidas por serem pioneiras no Ensino Superior de Química no Brasil, e a presença em sebos é um indício da difusão das obras no país. Utilizando como critério a presença simultânea nessas três bases de dados, chegou-se a uma relação de 31 livros didáticos de Química Geral, compreendendo o período de 1901 a 1999. Os livros preliminarmente selecionados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Livros didáticos de Química Geral selecionados para esta pesquisa

Ano da publicação	Obra	País de Origem
1901	TROOST, L. Compendio de chimica . Rio de Janeiro: H. Garnier.	França
1904	TEIXEIRA, M. J. Noções de chimica geral . 6. ed. Rio de Janeiro: Francisco Alves.	Brasil
1911	NERNST, W. Traité de chimie générale . v. 1 e 2. Paris: Librairie Scientifique. 932 p.	Alemanha
1913	MACIEL, M. Elementos de chimica geral . 2. ed. Rio de Janeiro: Francisco Alves.	Brasil
1917	McPHERSON, W.; HENDERSON, W. E. An elementary study of chemistry . 2th. ed. revised. Boston: The Atheneum Press. 576 p.	EUA
1924	OSTWALD, W. Compendio de química general . Barcelona: Manuel Marín. 733 p.	Alemanha
1927	BOLL, M. Cours de chimie . v. 1. Paris: Dunod. 571 p.	França

³⁷ Página eletrônica: <<http://www.estantevirtual.com.br/>>. Acesso em: 26 de julho de 2011.

1927	LAMIRAND, J.; BRUNOLD, Ch. Cours de chimie . Paris: Masson et Cie. 574 p.	França
1928	BAVINK, B. Introducción a la química general . Barcelona: Labor. 181 p.	Alemanha
1931	FRANCA, L. Apontamentos de chimica geral . 5. ed. Rio de Janeiro: Pimenta de Mello.	Brasil
1932	PUIG, Pe. I. Curso geral de chimica . Porto Alegre: Livraria do Globo. 514 p.	Espanha
1939	DEMING, H. G. General chemistry : an elementary survey. 4th. ed. New York: John Wiley e Sons. 769 p.	EUA
1943	BABOR, J. A. Química general moderna . 2. ed. Barcelona: Manuel Marín. 620 p.	EUA
1944	BRINKLEY, S. R. Principles of general chemistry . 3rd. ed. New York: The Macmillan Company.	EUA
1946	HOLMES, H. N. Introductory college chemistry . 4th. ed. New York: The Macmillan Company. 590p.	EUA
1950	PARTINGTON, J. R. Quimica general e inorganica . Madrid: Dossat. 1120 p.	Inglaterra
1965	HARDWICK, E. R. Química . São Paulo: Edgard Blücher. 337 p.	EUA
1967	PAULING, L. Química Geral . Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico. 774 p.	EUA
1967	OHLWEILER, O. A. Introdução à Química Geral . Porto Alegre: Globo. 637 p.	Brasil
1968	SIENKO, M. J; PLANE, R. A. Química . 2. ed. São Paulo: Nacional. 650 p.	EUA
1970	MAHAN, B. H. Química : um curso universitário. São Paulo: Edgard Blucher. 654 p.	EUA
1974	PIMENTEL, G. C.; SPRATLEY, R. D. Química : um tratamento moderno. 2v. São Paulo: Edgard Blücher. 777 p.	EUA
1977	SLABAUGH, W. H. PARSONS, T. D. Química Geral . Rio de Janeiro: LTC. 277 p.	EUA

1977	O'CONNOR, R. Fundamentos de química . São Paulo: Harper e Row do Brasil. 669 p.	EUA
1978	MASTERTON, W. L.; SLOWINSKI, E. J. Química Geral superior . 4. ed. Rio de Janeiro: Interamericana. 583 p.	EUA
1979	QUAGLIANO, J. V.; VALLARINO, L. M. Química . 3 ^a ed. Rio de Janeiro: Guanabara. 855 p.	EUA
1981	RUSSELL, J. B. Química Geral . São Paulo: McGraw-Hill do Brasil. 897 p.	EUA
1986	BRADY, J. E.; HUMISTON, G. E. Química Geral . 2v. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC. 661 p.	EUA
1998	KOTZ, J. C.; TREICHEL Jr., P. Química e Reações Químicas . 2v. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC. 730 p.	EUA
1999	BROWN, T. L.; LEMAY, H. E. Jr.; BURSTEN, B. E. Química: Ciência Central . 7. ed. Rio de Janeiro: LTC. 702 p.	EUA
2001 ³⁸	ATKINS, P. W.; JONES, L. Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente . Porto Alegre: Bookman. 914 p.	EUA

Dos 31 livros selecionados, 26 foram investigados nesta dissertação. Cinco dos livros listados acima não estavam disponíveis para consulta, por razões diversas, no período de desenvolvimento desta dissertação, e por isso não foram analisados: Troost (1901), Teixeira (1904), Maciel (1913), Franca (1931) e Brinkley (1944). Os quatro primeiros pertencem a um período em que o conceito de orbital não estava presente nos livros de Química Geral e, portanto, não são relevantes para a presente pesquisa. Assim, esta pesquisa abrange 26 livros de Química Geral para o Ensino Superior utilizados durante o século XX no Brasil, publicados entre 1911 e 2001.

5.2. Estrutura da análise dos livros didáticos

Esta dissertação visa investigar como o conceito de orbital foi apresentado ao longo do século XX nos livros selecionados, especialmente no que diz respeito ao estatuto ontológico e epistemológico expresso nos livros em relação a esse conceito.

³⁸ Este livro foi selecionado pelo fato de a edição americana ser datada de 1999. A tradução brasileira corresponde a essa edição americana, podendo, portanto, ser considerada representativa do final do século XX.

Para tanto, construímos a seguinte metodologia, de cunho essencialmente qualitativo, baseada nos referenciais teóricos apresentados até aqui. Os referenciais nos proporcionam modos de entender o conceito de orbital, delimitando aspectos considerados importantes para investigação, e fornecendo subsídios para *sistematizar* e *analisar* os dados obtidos ao longo da pesquisa (BOGDAN & BIKLEN, 1994).

A finalidade desta pesquisa não é indicar eventuais *erros conceituais* dos livros didáticos no que diz respeito ao orbital, mas caracterizar como os autores dos livros *pensam* e *empregam* esse conceito. Seguindo Bogdan e Biklen (1994), as diferenças entre o referencial teórico e os dados coletados não são vistas como *erro*: o que se pretende é estudar os conceitos na forma como eles são expressos pelos livros didáticos e, a partir disso, criar um diálogo com os referenciais teóricos. Reflexões decorrentes dessa análise permitem novas compreensões do conceito de orbital e, eventualmente, novas estratégias para seu ensino.

Para isso, investigamos, primeiramente, os capítulos de apresentação dos livros didáticos, em particular os prefácios e outras seções com finalidade semelhante, a fim de identificar dados para a caracterização dos livros: o país de origem; o público ao qual o livro se destina; os objetivos didático-pedagógicos, bem como outras informações dessa natureza, explicitados pelos autores, editores e tradutores; e possíveis concepções epistemológicas sobre a química expressas nessas seções. Esse levantamento teve como finalidade contextualizar cada obra, entendendo-a como oriunda de um contexto social, histórico, filosófico e educacional definido. Tais aspectos influenciam, direta ou indiretamente, a apresentação do conceito de orbital. Além disso, a sistematização dessas informações permite compreender de modo mais amplo esse conceito, enriquecendo a análise proposta.

Em relação à metodologia empregada na análise do conceito de orbital, destaca-se que, em um primeiro momento, optou-se por verificar como o orbital é apresentado em toda a extensão do livro, em detrimento da seleção de um ou mais capítulos particulares. Por meio desse primeiro levantamento, observou-se que o conceito de orbital é introduzido e discutido explicitamente, pela primeira vez, em capítulos dedicados à *estrutura da matéria*. Em capítulos posteriores, especialmente os dedicados à discussão da *teoria quântica da ligação química*, em que o conceito de orbital é central nas explicações, os autores não retomam considerações profundas sobre o orbital, tal como nos capítulos em que introduziram o conceito. Assim, nossa análise se concentrou principalmente, mas não somente, naqueles primeiros capítulos, dada a riqueza de detalhes presentes neles. No entanto, ressaltamos que essa é uma opção metodológica visando delimitar a investigação.

Tendo isso em vista, três categorias foram propostas com o intuito de sistematizar os dados e analisar como o conceito de orbital foi apresentado pelos livros de Química Geral ao longo do século XX: *base conceitual do orbital*; *representação icônica do orbital*; e *representação simbólica do orbital*. Essas categorias buscam identificar: como o conceito de orbital foi definido pelos autores; qual(is) relação(ões) se estabelece(m) com as compreensões ontológicas e epistemológicas mais amplas da Mecânica Ondulatória introduzidas pelos livros; como as representações de caráter icônico e simbólico, identificadas como se referindo ao conceito de orbital, são apresentadas aos leitores; quais os significados (ontológicos e epistemológicos) que essas representações transmitem ao leitor; e, por fim, as relações que as três categorias estabelecem entre si para o entendimento do conceito de orbital.

A categoria *base conceitual do orbital* abrange como o orbital foi definido pelos autores, focando, preferencialmente, nos momentos em que a definição é explícita. Além disso, também foi investigado o significado atribuído ao orbital em considerações posteriores e, quando contrastante com a definição inicial, foram estabelecidas comparações entre as diferentes compreensões expressas em um mesmo livro. Esta categoria foi influenciada, em parte, pelos debates suscitados pelo artigo e editorial da revista *Nature* (vide **Capítulo 2**), no qual um grupo de autores considera o orbital como a função de onda, enquanto outro grupo o entende como a densidade de probabilidade. Em vista disso, buscou-se identificar se tal dicotomia ocorria nos livros didáticos, bem como em quais situações.

Ainda nessa categoria, compilamos as considerações ontológicas e epistemológicas em relação à Mecânica Quântica expressas nos livros antes da introdução do conceito de orbital, e que se relacionam com, ou têm consequências indiretas sobre, a apresentação subsequente desse conceito. Procuramos identificar se aquelas considerações são coerentes com a apresentação posterior do orbital, e quais compreensões elas podem sugerir sobre esse conceito.

As categorias *representação icônica do orbital* e *representação simbólica do orbital* são fundamentadas na semiótica peirceana, brevemente delineada no **Capítulo 4**. Conforme mencionado, *signos* ou *representações* são passíveis de inúmeras categorizações, não excludentes: um dado signo ocorre como uma mistura de caracteres. Ainda assim, é possível considerar que um dado caráter seja observado em primazia em uma dada representação.

Nesta dissertação, nos deteremos na relação do signo com o objeto e, conseqüentemente, nas manifestações: *ícone*; *índice*; e *símbolo*. Assim, concebemos as categorias *representação icônica* e *representação simbólica* para sistematizar e analisar a apresentação do conceito de orbital. Tais categorias remetem ao caráter mais saliente das

representações investigadas nos livros. Não se observou, de maneira tão difundida ao longo dos livros, a presença de representações indiciais do orbital. Todavia, existem contextos dentro das categorias *representação icônica* e *simbólica* do orbital em que a manifestação indicial se sobressai, contribuindo para atribuir realidade ao conceito investigado. Além disso, a análise feita nos capítulos a seguir não excluem considerações quanto às outras manifestações da representação.

A categoria *representação icônica do orbital* se refere às imagens que representam esse conceito através da similaridade na aparência, isto é, a imagem do orbital (representação) se relaciona com o orbital (objeto) através de certas qualidades da representação que, supostamente, remetem ao orbital. Por exemplo, uma qualidade presente em tais representações se refere à *forma* dos orbitais. Nessa categoria, direcionamos o olhar no sentido de avaliar como as imagens rotuladas ou descritas como orbitais são apresentadas pelos autores, e qual o significado ontológico e epistemológico sugerido por elas.

A seleção das imagens dos orbitais partiu de afirmações, por parte dos autores, seja nas legendas das imagens ou no corpo dos textos, de que tais imagens representam orbitais. Além disso, foram selecionadas, em especial, as imagens apresentadas e comentadas pela primeira vez em cada livro. Nesse contexto, os autores se dedicavam a explicar, por exemplo: como são obtidas as imagens; qual o seu significado; a que se referem no corpo da teoria (são representações da função de onda; ou são representações da densidade de probabilidade).

Além disso, retomando o caso da revista *Nature* descrito no **Capítulo 2**, nota-se que o artigo e, principalmente, o editorial dessa revista, apelaram às imagens de orbitais para subsidiar a afirmação da observação direta de orbitais. Considerando o referencial da seção 4.3.2, *Natureza Semiótica das Imagens*, as imagens publicadas na revista *Nature* não foram apresentadas como uma sugestão – uma manifestação *icônica* – mas como se referindo diretamente ao objeto, ou seja, uma manifestação *indicial*. Desse modo, na categoria *representação icônica do orbital*, também objetivamos identificar a natureza semiótica das imagens divulgadas como orbitais pelos livros; quais das referidas manifestações (icônica ou indicial) os livros de química geral tendem a sugerir em relação a essas imagens; e quais as implicações dessas sugestões.

A categoria *representação simbólica do orbital* tem por finalidade investigar as representações cujas interpretações são convencionadas como sendo orbitais. O leitor, após ter sido conduzido pelas convenções a identificar um dado símbolo como um orbital, deverá evocar uma ideia para interpretar o referido símbolo. O símbolo por si só não nos traz o orbital, seja no sentido dado pela *base conceitual do orbital* ou no proveniente da

categoria *representação icônica do orbital*: é necessário convencionar previamente o seu sentido.

Nesta dissertação, focaremos nas seguintes *representações simbólicas do orbital*: diagramas de orbitais, os quais, comumente, convencionam que *caixas* ou *traços horizontais*, acompanhados por letras e números, como, por exemplo, $1s$ __, dizem respeito a um orbital em particular; diagramas de energia de orbitais, os quais dispõem verticalmente essas representações segundo um eixo de energia; e equações matemáticas apresentadas diretamente ou indiretamente pelos livros como orbitais.

Embora diagramas exibam caracteres icônicos, tal como visto no **Capítulo 4**, enfocaremos nesta dissertação o caráter *simbólico* dos diagramas de energia, pois consideramos que essa seja sua manifestação mais saliente.

Nos debates que se seguiram à publicação do artigo sobre a *observação direta dos orbitais*, o estatuto ontológico e epistemológico dos diagramas de orbitais foi pouco discutido. Por isso, a categoria *representação simbólica do orbital* será discutida majoritariamente por meio do referencial da Semiótica Química, avaliando como os diagramas são comunicados aos leitores e qual o significado (ontológico e epistemológico) sugerido por eles.

Analisamos também como as equações matemáticas são comunicadas aos leitores, e qual o significado (ontológico e epistemológico) atribuído a elas pelos autores dos livros. Constatou-se que os livros recorrem amplamente a gráficos cartesianos para explicitar ou ilustrar o significado das equações. Apesar disso, não nos deteremos em profundidade na análise dos gráficos cartesianos, o que poderá ser objeto de trabalhos futuros.

Acrescentamos, ainda, que as duas categorias, *representação icônica e simbólica do orbital*, se encontram imbricadas com a primeira categoria, visto que a *base conceitual do orbital* deve subsidiar, em alguma medida, as referidas representações. Por consequência, objetivamos avaliar como se dá o diálogo entre a primeira categoria e as demais, particularmente quanto aos aspectos da base conceitual do orbital que são enfatizados naquelas representações.

Em suma, a análise dos dados obtidos dos livros de Química Geral será feita com o referencial das discussões contemporâneas em Filosofia da Química acerca do estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais, conforme delineado no **Capítulo 2**; e com o referencial da Semiótica Química, apresentado no **Capítulo 4**. O emprego conjunto de diferentes referenciais de análise almeja um enfoque complementar e aprofundado.

CAPÍTULO 6 – RESULTADOS E DISCUSSÃO

6.1. Sobre os livros didáticos investigados

Nesta seção, compilamos as seguintes características referentes aos 26 livros investigados: país de origem dos livros; idioma das edições analisadas; público alvo dos livros; pré-requisitos indicados por seus autores/tradutores/editores; e objetivos didático-pedagógicos descritos por seus autores/tradutores/editores.

6.1.1. Origem: a primazia dos livros estadunidenses

No Gráfico 1 podemos constatar que a maioria das edições originais dos livros analisados é de origem estadunidense:

Gráfico 1 – País de origem dos livros analisados

O Gráfico 1 abrange toda a amostra, o que pode sugerir que os livros de Química Geral oriundos dos Estados Unidos se distribuíram igualmente ao longo do século XX. No entanto, a penetração desses livros no Brasil se estabeleceu, de fato, na segunda metade do século XX: dos 18 livros de origem estadunidense, 14 são desse último período.

Em sua tese de doutorado, Souza (2012), cuja metodologia de seleção dos livros foi adotada nesta dissertação, descreve que essa “invasão” dos materiais estadunidenses, acompanhada de sua filosofia de ensino, é devida, principalmente, aos esforços de difusão da cultura estadunidense no período pós-guerra e, também, aos acordos educacionais firmados entre Brasil e Estados Unidos por volta da década de 1960. No final da década de

1950, a urgência por uma nova concepção de ensino universitário brasileiro conduziu o governo a buscar inspiração nos modelos de ensino considerados bem sucedidos na época e, para tanto, recorreu ao *United States Agency for International Development* (USAID). Os convênios MEC/USAID, firmados entre 1965 e 1967, previam muitas ações para melhorar o ensino básico e universitário brasileiro, entre as quais “a facilitação do acesso de estudantes de nível superior aos livros técnicos, em número cada vez maior e a baixo custo” (SOUZA, 2012, p. 105). O decreto nº 59.355, de 4 de outubro de 1966, criou a *Comissão do Livro Técnico e do Livro Didático* (COLTED). Esses eventos ajudam a entender por que a maioria dos livros analisados, correspondentes à segunda metade do século XX, são de origem estadunidense.

Como constataremos mais adiante, a apresentação do conceito de orbital se estabelece nos livros na segunda metade do século XX, sendo, portanto, fortemente influenciada pelos preceitos editoriais, sociais, educacionais e filosóficos do contexto estadunidense.

6.1.2. Idioma: primazia de traduções para a língua portuguesa

Embora a maioria dos livros de Química Geral seja de origem estadunidense, os livros selecionados são predominantemente edições traduzidas para o português. Podemos constatar isso através do Gráfico 2, que apresenta os idiomas nos quais os livros selecionados estão, ou estiveram, disponíveis no Brasil:

Gráfico 2 – Idiomas em que os livros selecionados estão disponíveis

Quando nos concentramos na segunda metade do século XX, verifica-se que todos os livros selecionados encontram-se em língua portuguesa (um dos livros foi escrito por

autor brasileiro, e os demais são traduções). Essa característica dos livros investigados também pode ser entendida, em parte, como consequência dos acordos MEC/USAID, pois uma das estratégias para a facilitação do acesso dos estudantes aos livros técnicos foi o emprego de textos em língua nativa.

6.1.3. Público alvo: químicos e profissionais de áreas correlatas

As seções iniciais dos livros de Química Geral, que antecedem a discussão do conteúdo propriamente dito, são voltadas para a apresentação da obra e abrangem indicações como: público alvo ao qual se destina o livro; requisitos para leitura e compreensão da obra; e objetivos didático-pedagógicos almejados pelos autores. Essas seções abrangem os prefácios (ou introduções) do autor e notas dos tradutores e/ou editores das obras. Na Tabela 2 compilamos o público alvo indicado pelos livros.

Tabela 2 – Público alvo dos livros de Química Geral

Obras	Público alvo	Número de livros
Deming (1939); Babor (1943); Holmes (1946); Partington (1950); Mahan (1970); Pimentel e Spratley (1974);); O'Connor (1977); Masterton e Slowinski (1978); Quagliano e Vallarino (1979); Russell (1981); Kotz e Treichel (1998); Brown, LeMay e Bursten (1999); Atkins e Jones (2001).	Cursos universitários introdutórios de Química para químicos e profissionais de áreas correlatas ³⁹	13
Puig (1932); Pauling (1967); Sienko e Plane (1968).	Cursos universitários introdutórios de Química para químicos e profissionais de áreas correlatas; e pré-universitários ⁴⁰	3
Slabaugh e Parsons (1977); Brady e Humiston (1986).	Cursos universitários introdutórios de Química para químicos	2
Hardwick (1965).	Estudantes universitários para os quais a Química não é o objetivo principal	1

³⁹ Uma parte dos livros não indica, tal como o apresentado aqui, o público alvo, descrevendo, por exemplo, que esse se destina a estudantes universitários cursando Química Geral. Nesses casos, inferimos que esses estudantes sejam tanto os estudantes de química quanto estudantes de áreas correlatas.

⁴⁰ Destacamos que a designação *pré-universitário* não se refere ao contexto brasileiro, em particular, ao nosso Ensino Médio, mas às estruturas de ensino dos países de origem das publicações.

Os sete livros selecionados para análise nesta dissertação que não constam na tabela acima não apresentam nenhuma consideração quanto ao público alvo, ou não o descrevem de maneira suficientemente precisa para serem agrupados nos grupos delimitados.

Considerando os dados expressos na Tabela 2, boa parte dos livros eram explicitamente indicados para cursos universitários introdutórios de Química, cujo objetivo seria subsidiar a formação de químicos e profissionais de áreas correlatas. Desse modo, esses livros tiveram como característica atender à formação de um amplo grupo de profissionais de áreas científicas e engenharias.

Outro ponto a ser ressaltado se refere ao fato de que alguns dos livros da Tabela 2 visavam subsidiar, além de cursos universitários introdutórios de Química, cursos pré-universitários, sugerindo que os autores não faziam distinção entre conteúdos de Química pré-universitária e universitária, ainda que os objetivos fossem diferentes para cada um desses níveis.

6.1.4. Ausência de requisitos particulares

Poucos, dentre os livros analisados, indicam a necessidade de requisitos anteriores dos estudantes que cursarão Química Geral, visando melhor compreensão dos tópicos. De maneira geral, esses livros sugerem a necessidade de conhecimentos anteriores de Química e Matemática elementar, sendo que dois livros apontam a necessidade de Cálculo Diferencial e Integral: Bavink (1928), e Mahan (1970)⁴¹. A não exigência de conhecimento prévio sobre cálculo diferencial e integral tem como consequência um tratamento essencialmente, ou majoritariamente, qualitativo, por exemplo, da descrição mecânico-quântica da matéria presentes nos livros – cuja compreensão, em cursos avançados, se estrutura em conhecimentos matemáticos aprofundados.

Se alguns autores apontaram a necessidade de conhecimentos prévios, outros conceberam seus livros tendo como premissa, explicitada nos textos, que os leitores não tiveram contato anterior com disciplinas de química: são os casos de Russell (1981)⁴², Brady e Humiston (1986), e Kotz e Treichel (1998). Holmes (1946) e Pauling (1967) indicaram que seus livros poderiam ser utilizados tanto por estudantes com conhecimentos anteriores em Química quanto por aqueles que não tiveram contato prévio com essa disciplina.

⁴¹ Mahan (1970) somente aponta esse pré-requisito no capítulo destinado à Mecânica Quântica.

⁴² Além de Química, Russell (1981) também dispensou a necessidade de pré-requisitos em Cálculo e Física.

6.1.5. Objetivos didáticos-pedagógicos: o ensino dos princípios da Química

A maioria dos livros de Química Geral discorre, nas seções iniciais, sobre objetivos didático-pedagógicos da obras. Essa descrição acaba por revelar, também, algumas orientações epistemológicas em relação à disciplina de Química. Constata-se, nessas considerações, a recorrência do ideal de ensinar os princípios da Química aos estudantes, tal como exemplificado pelas seguintes citações:

[...] a função mais importante do texto elementar [em Química] é desenvolver os princípios da ciência. (MCPHERSON & HENDERSON, 1917, p. ix, grifo nosso)

[...] as estruturas atômicas são a única chave racional, a única explicação científica, das propriedades e das reações dos elementos e seus compostos. [Tal orientação epistemológica visa] reduzir a um mínimo a parte empírica da Química (IBARZ⁴³ in BABOR, 1943, p. VIII)

[...] os dados acumulados foram submetidos a um processo de sistematização, de síntese e de generalização, que criou as condições para o tratamento dos problemas não mais de um ponto-de-vista estritamente fenomenológico, mas a partir de um conjunto coerente de princípios e teorias gerais assentadas nas propriedades atômicas e moleculares fundamentais. (OHLWEILER, 1967, p. VII, grifo nosso)

[A orientação epistemológica do livro é combinar fatos com a teoria,] ênfatizando a aplicação dos princípios⁴⁴ [mais] do que sua derivação. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. VII, grifo nosso)

[...] para a sua compreensão [i.e., da Química], é necessário fazer-se uma racionalização dos fatos experimentais à base da teoria. [...] desde que um estudante tenha sido iniciado nos fatos fundamentais da Química, torna-se importante fornecer-lhe princípios de orientação que o auxiliem na explicação de fatos já conhecidos, bem como na proposição de estruturas gerais e comportamentos dos elementos e dos compostos que ainda não lhe são familiares. (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, prefácio da terceira edição, grifo nosso)

[...] oferecer ampla visão dos princípios da Química e da reatividade dos elementos e compostos químicos. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. v, grifo nosso)

Este livro-texto está organizado para mostrar a construção e o refinamento de nossa compreensão da matéria. Começando com átomos, construímos os conceitos da Química iniciando pelos princípios fundamentais e uma visão química da natureza. (ATKINS & JONES, 2001, p. XIII, grifo nosso)

Como destaca Souza (2012), a ênfase nos *princípios* da Química, em detrimentos dos *fatos* (propriedades e usos das substâncias, como na química descritiva) foi fortemente recomendada pela comunidade de químicos estadunidenses no século XX, refletindo nas orientações epistemológicas dos livros. Souza (2012) notou que os conteúdos da química

⁴³ Ibarz é o tradutor do livro.

⁴⁴ No capítulo 1, Masterton e Slowinski (1978) citam “princípios, ou ‘leis’” (*ibid.*, p. 1).

descritiva foram perdendo importância no decorrer do século XX, adquirindo um caráter meramente ilustrativo dos princípios da Química.

No entanto, há que se ressaltar, tomando como referência as seções iniciais de apresentação das obras, que nenhuma delas expressa o que se entende por *princípios da Química*. Em alguns livros, sugere-se que os princípios são as leis químicas, em outros, que são as teorias químicas, e em outros, ainda, que esses princípios são a fusão de ambos. Em nosso entendimento, os princípios são as *leis* e *teorias* químicas empregadas para *sistematizar, prever e explicar* os fatos químicos.

Esse deslocamento da ênfase dos fatos químicos em direção aos princípios químicos, observado por Souza (2012), diz respeito, em outros termos, a um deslocamento de considerações particulares (fatos químicos) em direção a considerações gerais (princípios).

Essa característica dos livros é fruto, como pontuou Scerri (2000b), da influência crescente que a Física teve na Química durante o século XX e, particularmente, da tese de que a última, em princípio, poderia ser reduzida à primeira, isto é, as *verdadeiras* explicações seriam oriundas da Física. Segundo Scerri (2000b), a crescente importância atribuída aos princípios físicos, particularmente a Mecânica Quântica, para explicar a estrutura da matéria e a tabela periódica, levou a se negligenciar os aspectos qualitativos e a diversidade de substâncias e fenômenos observados.

6.2. Quando o conceito de orbital foi introduzido nos livros de Química Geral?

Os livros investigados podem ser agrupados em três períodos em relação à apresentação da Mecânica Quântica e, especialmente, do conceito de orbital, tal como expresso na Tabela 3.

Tabela 3 - Presença do conceito de orbital nos livros didáticos de Química Geral

Período*	Característica	Número de livros
1911-1932	Ausência de tópicos referentes à Mecânica Quântica	7
1939-1946	Breve introdução ou menção à Mecânica Quântica (não há menção ao conceito de orbital)	3 ⁴⁵
1950-2001	Discussão pormenorizada da Mecânica Quântica e do conceito de orbital	16

⁴⁵ O livro de Babor (1943), embora tenha sido publicado nesse período, não apresenta uma menção ou introdução à Mecânica Quântica – contrastando, portanto, com a referida característica dos demais livros do período.

*As datas utilizadas como limites são referentes aos anos em que os livros foram publicados. Por exemplo, 1932 remete ao ano de publicação do livro de Puig (Tabela 1), enquanto que 1939 remete ao livro imediatamente posterior ao citado, a saber, Deming (Tabela 1).

Os períodos descritos na Tabela 3 serão apresentados e discutidos nas próximas subseções. Discussão mais aprofundada do terceiro período (1950-2001), em que o conceito de orbital se consolida nos livros de Química Geral, será feita na seção seguinte.

6.2.1. Período 1911-1932: um conceito ainda em gestação

Se considerarmos como marcos da Mecânica Quântica os trabalhos de Werner Heisenberg (1901-1976), Pascual Jordan (1902-1980) e Max Born (1882-1970) relativos à Mecânica Matricial, publicados nos anos de 1925 e 1926, e os trabalhos de Erwin Schrödinger (1887-1961) sobre a Mecânica Ondulatória, publicados no decorrer de 1926, naturalmente compreendemos a ausência de tópicos referentes à Mecânica Quântica nos livros de Química Geral deste período (Tabela 3). Além disso, destacamos que é nesse período que foi cunhada a palavra *orbital* (VEMULAPALLI, 2008). Em 1932, Robert Mulliken (1896-1986) enunciou pela primeira vez os conceitos de orbital e de orbital molecular, no periódico *Physical Review*, para “descrever as funções de onda que são funções de um (e somente um) elétron” (VEMULAPALLI, 2008, p. 170).

6.2.2. Período 1939-1946: um conceito ainda a ser divulgado

Os livros de Química Geral deste período se caracterizam por uma menção ou breve introdução à Mecânica Quântica, sem, contudo, qualquer menção ao conceito de orbital. Considerando os marcos de fundação da Mecânica Quântica citados no tópico anterior, pouco mais de 10 anos se passaram entre as primeiras publicações e a menção desses novos conhecimentos nos livros de Química Geral.

Estamos considerando uma menção à Mecânica Quântica por parte dos livros de Química Geral o uso de uma nota de rodapé ou uma breve descrição, de não mais que um parágrafo, no corpo do texto. Por exemplo, Holmes (1946) descreve, em um único parágrafo, a concepção da Mecânica Ondulatória em relação ao comportamento do elétron no átomo, segundo a qual “o elétron se move em pulsos de energia, do mesmo modo que ondas, não como partículas” (ibid., p. 259). Holmes (1946) acrescenta que a “ideia de nível de energia é mantida” (ibid., p. 259) na Mecânica Ondulatória. Esse autor apresenta a concepção da Mecânica Ondulatória visando compará-la com o modelo de Bohr e o modelo de Lewis, apresentados no livro em maior profundidade.

Deming (1939) reserva um tópico do seu livro, com pouco mais de uma página, para discutir a Mecânica Ondulatória. Segundo Deming (1939), há “uma dificuldade fundamental” em imaginar o elétron como uma partícula, pois a “matemática mostrou que não existe uma resposta definida para a questão de onde se poderia esperar encontrar um elétron girando em qualquer momento particular” (ibid., p. 345). O autor esclarece que uma nova compreensão foi possível por meio da proposição da natureza ondulatória do elétron, a qual permitiu considerar que os elétrons “preenchem toda a órbita” (ibid.). Deming (1939) acrescenta que o sistema *núcleo e elétrons* é descrito por equações matemáticas que apresentam a mesma forma das equações do movimento ondulatório, mas salienta que novas variáveis são consideradas. Deming (1939) enfatiza que as equações do movimento ondulatório não têm “qualquer existência no tempo e espaço ordinário” (ibid., p. 346) para duas ou mais partículas correlacionadas.

Embora os livros deste período apresentem, ainda que rapidamente, a compreensão da estrutura da matéria proveniente da Mecânica Quântica, não há um aprofundamento desse assunto. Os autores dos livros de Química Geral deste período, provavelmente, visam alertar aos leitores de que existe uma compreensão mais recente em desenvolvimento. Além da dificuldade inerente a tais conhecimentos, por conta da matematização e abstração, de modo a impossibilitar uma discussão aprofundada em cursos introdutórios de Química, os autores deste período são cautelosos quanto aos êxitos da Mecânica Quântica e suas implicações para a Química. Deming (1939), por exemplo, expressa que o “pensamento químico parece estar em um estágio de transição” (DEMING, 1939, p. 346).

6.2.3. Período 1950-2001: introdução e estabelecimento do conceito de orbital

O referido período se caracteriza por apresentar o objeto da presente pesquisa, a saber, o conceito de orbital. Tomando como referência histórica os trabalhos de Heisenberg e Schrödinger, e especialmente os de Mulliken, aproximadamente 20 anos decorreram entre a publicação desses trabalhos e sua posterior transposição didática para os livros de Química Geral para o Ensino Superior.

O conceito de orbital é apresentado, pela primeira vez, aos leitores dos livros de Química Geral em capítulos que denominaríamos, genericamente, de tópicos sobre a *estrutura da matéria*. De maneira geral, os capítulos iniciam com uma discussão da velha teoria quântica, passando pelo modelo atômico de Bohr e, por fim, discutem a Mecânica Ondulatória de Schrödinger. Na Tabela 4 indicamos o capítulo em que o conceito de orbital é exposto, pela primeira vez, em cada livro de Química Geral investigado.

Tabela 4 – Capítulo em que o conceito de orbital é introduzido

Livro	Número e título do capítulo	Número de páginas do capítulo	Número de capítulos do livro
Partington (1950)	Cap. 10 – A teoria quântica do átomo	31 p.	31
Hardwick (1965)	Cap. 8 – Estrutura eletrônica dos átomos	28 p.	15
Pauling (1967)	Cap. 8 – Teoria quântica e estrutura molecular	29 p.	33
Ohlweiler (1967)	Cap. 3 – Estrutura extranuclear	49 p.	20
Sienko e Plane (1968)	Seção Princípios da Química Cap. 3 – Átomos	40 p.	29
Mahan (1970)	Cap. 10 – Estrutura eletrônica dos átomos	39 p.	19
Pimentel e Spratley (1974)	Vol. 2 Cap. 12 – A Mecânica Quântica e o átomo de hidrogênio	33 p.	21
Slabaugh e Parsons (1977)	Cap. 2 – Estrutura eletrônica dos átomos	23 p.	15
O'Connor (1977)	Cap. 2 – Elétrons em átomos	14 p.	42
Masterton e Slowinski (1978)	Cap. 6 – A estrutura eletrônica dos átomos	25 p.	25
Quagliano e Vallarino (1979)	Cap. 12 – O sistema periódico e a estrutura eletrônica dos elementos	33 p.	36
Russell (1981)	Cap. 6 – Elétrons: energias, ondas e probabilidades	36p.	24
Brady e Humiston (1986)	Vol. 1 Cap. 3 – Estrutura atômica e a tabela periódica	51 p.	17
Kotz e Treichel (1998)	Vol. 1 Parte 2 Cap. 7 – Estrutura atômica	27 p.	24
Brown, LeMay e Bursten (1999)	Cap. 6 – A estrutura eletrônica dos átomos	26 p.	25
Atkins e Jones (2001)	Cap. 1 Átomos: o mundo quântico ⁴⁶	45 p.	19

A Tabela 4 evidencia que, de maneira geral, o conceito de orbital e, em sentido mais amplo, a Mecânica Quântica, são discutidos em capítulos iniciais dos livros. Subjacente à discussão da Mecânica Quântica está a concepção de os livros iniciarem a discussão da Química, como relatado anteriormente, por meio da introdução dos *princípios químicos*. Essa orientação epistemológica nos leva a entender a referida organização dos livros, pois

⁴⁶ O livro de Atkins e Jones (2001), diferentemente dos demais, apresenta uma seção anterior aos capítulos, denominada de *Fundamentos da Química*. Esta seção tem 101 páginas e visa preparar os alunos que não tiveram contato com uma disciplina de Química antes do curso universitário. Segundo os autores, essa seção é uma “orientação introdutória para a disciplina” (ibid., p. XXIV).

são priorizados, nos capítulos iniciais, os princípios químicos que, por sua vez, proporcionaram toda a sustentação dos capítulos posteriores.

A partir da introdução e discussão do conceito de orbital, os livros de Química Geral fazem uso dele em capítulos posteriores. O Quadro 1 ilustra alguns tópicos em cujas explicações os livros de Química Geral analisados evocam explicitamente o conceito de orbital.

Conceitos	
Ligação química	Teoria da ligação de valência
	Teoria da hibridização de orbitais
	Teoria de orbitais moleculares
	Teoria de bandas ⁴⁷
Blindagem da carga nuclear e carga nuclear efetiva (Z^*)	
Potencial de ionização	
Polaridade da ligação	
Forças intermoleculares – Forças de London	
Afinidade eletrônica	
Ácido e base de Lewis	
Transição eletrônica	

Quadro 1 – Utilização do conceito de orbital para a explanação de conceitos

O Quadro 1 evidencia a importância do conceito de orbital nos livros de Química Geral, dada a abrangência dos tópicos nos quais se recorre a ele para a explicação de conceitos (químicos e físicos). Notadamente, a ligação química é o tópico em cuja discussão o conceito de orbital tem maior destaque, e está presente em todos os livros analisados (nem todos os conceitos listados no Quadro 1 são citados e discutidos em todos os livros analisados). Nas discussões mais específicas sobre o conceito de orbital serão comentados explicitamente os empregos relatados nesse quadro.

A discussão que se segue visa delimitar como o conceito de orbital foi apresentado pelos livros de Química Geral ao longo do século XX. Conforme descrito no **Capítulo 5**, foram concebidas as seguintes categorias, que serão discutidas daqui em diante, visando sistematizar e analisar os dados levantados nos livros de Química Geral do século XX: i) *base conceitual do orbital*; ii) *representação icônica do orbital*; e iii) *representação simbólica do orbital*.

⁴⁷ A teoria de bandas é, em linhas gerais, uma descrição da ligação de metais e semicondutores por meio da teoria de orbitais moleculares.

6.3. Base conceitual do orbital

Antes de abordar propriamente o conceito de orbital, faz-se necessário compreender como a Mecânica Ondulatória é apresentada nos livros analisados, visto que é a partir dessa teoria que o conceito de orbital se origina, tal como enunciado por Robert Mulliken.

6.3.1. Considerações ontológicas e epistemológicas sobre a Mecânica Ondulatória

6.3.1.1. Origens e fundamentos da Mecânica Ondulatória

Os livros de Química Geral apontam que a Mecânica Ondulatória foi proposta pelo físico Erwin Schrödinger (1887-1961). Há, de maneira geral, consenso entre os livros de que essa teoria é tributária dos trabalhos de Louis de Broglie (1892-1987), a respeito do caráter ondulatório da matéria, e do princípio da incerteza de Werner Heisenberg (1901-1976), o qual descreve, segundo entendimento expresso nos livros, que não podemos determinar simultaneamente o momento e a posição do elétron. Os livros são categóricos em afirmar que é por consequência do princípio da incerteza que podemos determinar apenas probabilisticamente a posição do elétron, no âmbito da Mecânica Ondulatória de Schrödinger.

Os livros de Química Geral também reconhecem a importância da ideia de quantização, presente na teoria atômica de Bohr e oriunda dos trabalhos de Max Planck, na teoria de Schrödinger. Segundo os livros, enquanto na teoria de Bohr a ideia de quantização figura como um *postulado*, na Mecânica Ondulatória de Schrödinger a quantização surge naturalmente a partir da imposição de condições de contorno tal como na física ondulatória clássica.

Por fim, não há qualquer menção dos livros aos trabalhos de Robert Mulliken nos capítulos sobre a *estrutura da matéria*. Apesar de sua contribuição ter sido dirigida, especialmente, para a descrição da ligação química, o que justificaria a omissão naquele capítulo, Mulliken enunciou um primeiro entendimento tanto para o significado de *orbital molecular* quanto de *orbital*. O conceito de orbital é introduzido somente nos capítulos sobre a estrutura da matéria.

6.3.1.2. Os constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória

Tendo introduzido os fundamentos da teoria de Schrödinger, os livros de Química Geral descrevem os constructos matemáticos concebidos por esse físico para descrever o comportamento do elétron no átomo. Em nossa investigação, identificamos que diferentes constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória de Schrödinger são mencionados pelos livros. Um grupo de autores descreve que Schrödinger propôs uma equação baseada na teoria ondulatória clássica para descrever o elétron no átomo, sendo que as soluções dessa equação, denominadas funções de onda Ψ , resultam no conceito de densidade de probabilidade $|\Psi^2|$. Outro grupo de autores omite a equação de Schrödinger, mencionando a função de onda Ψ e sua relação com o conceito de densidade de probabilidade $|\Psi^2|$. Há, ainda, um grupo de livros que faz menção unicamente à função de onda, sem mencionar o conceito de densidade de probabilidade. Por fim, um quarto grupo negligencia a existência da função de onda, partindo diretamente do conceito de *densidade de probabilidade*, sem explicitar a relação desse conceito com a função de onda Ψ . A tabela abaixo expõe a distribuição dos constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória mencionados, relacionando-os com os livros investigados.

Tabela 5 – Constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória mencionados pelos livros de Química Geral

Constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória	Livros	nº livros
1. Equação de onda; função de onda Ψ ; e densidade de probabilidade Ψ^2	Ohlweiler (1967); Mahan (1970); Pimentel e Spratley (1974); O'Connor (1977); Masterton e Slowinski (1978); Russell (1981); Brady e Humiston (1986); Kotz e Treichel (1998); Atkins e Jones (1999); Brown, LeMay e Bursten (1999).	10
2. Densidade de probabilidade	Hardwick (1965); Sienko e Plane (1968); Slabaugh e Parsons (1977); Quagliano e Vallarino (1979).	4
3. Função de onda Ψ ; e densidade de probabilidade Ψ^2	Partington (1950).	1
4. Função de onda Ψ	Pauling (1967).	1

A Tabela 5 evidencia que a maioria dos livros investigados menciona os principais constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória: a *equação de onda*; a *função de onda Ψ* ;

e a *densidade de probabilidade*. Contudo, poucos são, dentre os livros investigados, aqueles que detalham a natureza matemática desses constructos – sendo que a maioria somente menciona sua existência. Por ora, não serão especificados os autores que apresentam tais constructos aos estudantes. Esse aspecto será aprofundado, mais adiante, na *categoria representação simbólica do orbital*, pois entendemos que as equações matemáticas são manifestações, majoritariamente, simbólicas. Também se observou que, em um primeiro momento, nenhuma relação explícita é feita entre esses constructos matemáticos e o conceito de orbital.

6.3.1.3. Descrições *exatas* e *aproximadas* da equação de Schrödinger

Os autores do primeiro grupo da Tabela 5 expressam considerações epistemológicas sobre a equação de Schrödinger, particularmente sobre os limites e possibilidades provenientes de sua solução. Observa-se que os livros simplesmente mencionam que Schrödinger concebeu sua equação para descrever o comportamento do elétron no átomo, ou seja, não há, em linhas gerais, qualquer discussão sobre como as equações foram obtidas. Prioriza-se, para este e outros constructos matemáticos, o ensino dos resultados da Mecânica Ondulatória, sem explicitar seu processo de construção.

Apesar disso, os livros de Química Geral tecem considerações epistemológicas sobre a equação de Schrödinger. Enfatiza-se que, de maneira geral, a equação pode assumir diferentes naturezas, em particular no que diz respeito à sua solução, conforme a espécie química à qual se refere. Para espécies monoelétrônicas (átomos ou íons com um elétron), são apresentadas as seguintes descrições para a solução da equação de Schrödinger:

[A solução da equação de Schrodinger é bastante complexa e] só em muito poucos casos se conseguiram soluções exatas. (SLABAUGH & PARSONS, 1977, p. 31, grifo nosso)

[...] a equação de Schrodinger pode ser resolvida *exatamente* para o átomo de hidrogênio, mas não para os átomos ou íons mais pesados [número de elétrons ≥ 2]. Não obstante, os químicos admitem a hipótese de os orbitais dos outros átomos serem semelhantes aos do hidrogênio, embora os átomos possam fazer parte das moléculas. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 222, itálico do autor)

Observa-se que, de maneira geral, os autores descrevem que a equação de Schrödinger pode ser resolvida *exatamente* em certos casos, particularmente, para sistemas simples, exemplificados em alguns livros como sendo o átomo de hidrogênio. O que nos chama a atenção nas citações acima são as adjetivações atribuídas às soluções da

equação de Schrödinger para os referidos casos: *soluções exatas*⁴⁸. Tal adjetivação levanta a seguinte indagação: essas soluções são descrições fiéis da realidade tal como ela é? Os livros didáticos parecem sugerir que sim.

Por outro lado, as considerações epistemológicas apresentadas pelos livros em relação à equação de Schrödinger para espécies polieletrônicas (átomos ou íons com dois ou mais elétrons), enfatizam a natureza aproximada desses casos:

[O tratamento de átomos com muitos elétrons é um] processo matemático difícil, mas obtiveram-se resultados que estão em ótimo acordo com as experiências. [...] confiamos em que a Mecânica Quântica providencie uma descrição, sob todos os aspectos satisfatórios, mesmo para os átomos mais complicados. (MAHAN, 1970, p. 326)

[Em átomos polieletrônicos] a equação de Schrödinger baseada nesta energia potencial é praticamente impossível de ser resolvida exatamente, mas uma solução numérica exata pode ser obtida com o uso de computadores. [Apesar disso] químicos pensam *qualitativamente* acerca da estrutura dos átomos com muitos elétrons. (ATKINS & JONES, 2001, p. 156, grifo nosso)

De modo geral, nenhum dos livros de Química Geral aprofunda as explicações para a impossibilidade de se resolver *exatamente*, segundo a designação dos próprios livros, a equação de Schrödinger de espécies polieletrônicas. Os livros simplesmente assinalam que existem dificuldades na descrição devido à presença dos demais elétrons, bem como à interação desses elétrons com o núcleo, tal como exemplificado na citação abaixo:

Equações de onda, para átomos com muitos elétrons, não foram resolvidos com exatidão, principalmente devido aos problemas de interação de elétrons: um elétron interage com o núcleo e com os outros elétrons que existem na mesma região. (SLABAUGH & PARSONS, 1977, p. 35, grifo nosso)

Somente Ohlweiler (1967), Slabaugh e Parsons (1977), e Masterton e Slowinski (1978) mencionam uma limitação adicional em relação à equação de Schrödinger: a de que o quarto número quântico (número quântico de spin m_s) não provém da descrição de Schrödinger. Tal esclarecimento é exemplificado pela seguinte citação:

[...] um dos pontos fracos da equação de Schrodinger é o fato de que o número quântico rotatório não deriva do respectivo tratamento. Convém, entretanto, deixar registrado que a mecânica relativística de P. A. M. Dirac conduz a uma descrição da partícula em termos de quatro números quânticos, sendo que um deles determina o spin. (OHLWEILER, 1967, p. 70-71)

A dicotomia entre descrições *exatas* e *aproximadas* dos orbitais, presente nos livros, é um assunto debatido na literatura sobre o estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais

⁴⁸ Alguns poucos livros ainda utilizam o adjetivo *correto* para designar as soluções da equação de Schrödinger, como, por exemplo, Mahan (1970). Nesses casos, não consideramos *correto* como sinônimo de *exato*, dado que soluções aproximadas podem ser *corretas* dentro da precisão que quisermos.

(Capítulo 2). Entretanto, como os livros, em geral, discutem as soluções para a equação de Schrödinger antes de introduzir o conceito de orbital (Kotz e Treichel, 1998, é uma exceção), as consequências da dicotomia entre soluções exatas e aproximadas para o estatuto ontológico dos orbitais não ficam explícitas.

Scerri (2001) argumenta em favor de diferentes estatutos ontológicos para o orbital: descrições *exatas* dos orbitais se referem a algo existente na Natureza; enquanto que descrições *aproximadas* não se referem a um existente. O que se destaca nos livros didáticos, porém, é o *elétron* e as diferentes implicações de se descrever, de um lado, sistemas com um elétron e, de outro, sistemas com vários elétrons. Nesse contexto, os livros não põem em xeque a existência do elétron: ao contrário, tratam-no como uma *entidade* bem conhecida, cujo estatuto ontológico, evidentemente, não está posto em dúvida pela comunidade científica. Diante disso, constata-se que o objeto de interesse é o elétron, em detrimento do orbital, que somente mais adiante virá a ser discutido pelos livros. Adiantamos que a introdução posterior do conceito de orbital nos livros, e o emprego de suas representações, ofuscarão, em alguma medida, a relação entre *elétron* e *orbital*, de tal maneira que este terá primazia em relação àquele.

Diferentemente de Scerri (2001), a maioria dos autores envolvidos no debate critica essa dicotomia entre *exato* e *aproximado*, considerando que ela pode sugerir aos estudantes a existência de descrições fiéis da realidade (JENKINS 2003; OSTROVSKY, 2005; SCHWARZ, 2006; OGILVIE, 2011; LABARCA & LOMBARDI, 2010). Como esclarece Ostrovsky (2005), o termo *exato* pode ser entendido literalmente pelos estudantes de Química Geral, e até mesmo por estudantes de Química Quântica avançada. Esses autores apontam que qualquer descrição da Natureza se dá por aproximações. Não obstante, o caráter aproximado das descrições não diminuiria seu valor, pois cada descrição possui um contexto de aplicação e objetivos bem definidos (JENKINS, 2003). Além disso, cada descrição proporciona diferentes precisões numéricas, cada qual com diferentes interpretações qualitativas (OSTROVSKY, 2005).

A indicação de descrições exatas e aproximadas por parte dos livros também revela a falta de problematização do conceito de modelo científico, se considerarmos que uma teoria científica não faz referência direta à realidade. Essa relação é mediada por modelos científicos, que são idealizações de uma realidade complexa, segundo as quais se seleciona uma parte do mundo para investigar e, por aproximação, negligencia-se o restante (OSTROVSKY, 2005; LABARCA, 2006). Considerando essa concepção, seria relevante explicitar como as teorias e modelos científicos justificam suas aproximações e seus limites de aplicabilidade. Os livros, porém, não fornecem aos estudantes suficientes

esclarecimentos a esse respeito – em geral, se restringem a delimitar os limites de aplicação das diferentes equações de Schrödinger (para espécies monoelétrônicas e polieletrônicas).

6.3.1.4. A função de onda Ψ não possui significado físico

Como visto na Tabela 5, alguns autores mencionam explicitamente a função de onda Ψ , entendida como um constructo matemático da Mecânica Ondulatória de Schrödinger. Somente no primeiro grupo de livros da Tabela 5 há o entendimento, ainda que implícito em alguns casos, de que as soluções da equação de Schrödinger conduzem às energias permitidas do sistema e às funções de onda Ψ correspondentes. Poucos são os autores que fornecem algum detalhe acerca da função de onda Ψ :

[As funções de onda Ψ] podem ser escritas para dar a amplitude de cada onda como uma função de sua posição. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 102, grifo nosso)

[A função de onda Ψ] corresponde à amplitude da onda do elétron. (RUSSELL, 1981, p. 161, grifo nosso)

Ohlweiler (1967) e Pimentel e Spratley (1974) afirmam que a função de onda Ψ se refere à amplitude da *onda de matéria*. Tal compreensão, referente à amplitude, é proveniente da analogia com uma onda clássica, utilizada por Schrödinger. Além disso, a maioria dos livros, antes de introduzir a teoria de Schrödinger, apresenta conceitos básicos da teoria ondulatória clássica, tais como amplitude, frequência, comprimento de onda, e os nós das ondas, visando subsidiar a referida analogia. Também se observa, em certos livros, a discussão de algumas propriedades das ondas, tais como os fenômenos de difração e interferência (construtiva e destrutiva) entre ondas.

Oito livros, dentre os dezesseis da Tabela 5 que fazem menção explícita à função de onda, descrevem seu significado físico em passagens posteriores do texto. Em cinco livros se encontra a afirmação explícita de que *a função de onda não possui significado físico*: Ohlweiler (1967); Mahan (1970); Pimentel e Spratley (1974); Brown, LeMay e Bursten (1999); Atkins e Jones (2001). Outros três parecem compartilhar dessa ideia sem manifestá-la explicitamente, como nas citações a seguir:

Como se observou, a interpretação da função de onda em um estado dado é que Ψ^2 em qualquer ponto no espaço é proporcional à probabilidade de encontrar a partícula nesse ponto. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 106)

[...] o valor de Ψ^2 é mais importante. Este representa a *probabilidade de encontrar um elétron numa região estreita que está a uma distância r do núcleo*. (RUSSELL, 1981, p. 161)

Cada função de onda Ψ pode ser interpretada em termos de probabilidade. O quadrado de Ψ dá a probabilidade de se encontrar o elétron numa certa

região do espaço. O que os cientistas denominam a **densidade de elétrons** numa dada região do espaço. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 215)

Estas citações sugerem que a função de onda Ψ não possui significado físico ao recorrerem à função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , denominada de densidade de probabilidade, com intuito de lhe atribuir uma interpretação física. A atribuição de significado físico a Ψ^2 também se observa nos livros que afirmam explicitamente que a função de onda Ψ não possui significado físico. Em linhas gerais, portanto, a maioria dos livros que menciona a função de onda Ψ rejeita a ideia de que essa função possua significado físico.

A rejeição à realidade da função de onda Ψ , ou nos termos dos livros, o entendimento de que ela não possui significado físico, é tributária, como observa Pessoa Jr. (2007; CHIBENI, 1992), da interpretação positivista da Mecânica Quântica, defendida por Bohr, Heisenberg, Dirac, Born e Pauli. Para eles, a função de onda Ψ seria de natureza epistêmica, isto é, forneceria um meio para sistematizar os dados e fazer previsões de fenômenos observáveis, mas não informaria nada que fosse além dos experimentos, como, por exemplo, a respeito da realidade de entidades inobserváveis. No entanto, Pessoa Jr. (2007) esclarece que essa é *uma* postura interpretativa em relação à função de onda Ψ . Outra postura interpretativa tão legítima quanto essa, defendida por Einstein, Schrödinger e de Broglie, seria considerar que a função de onda Ψ se refere a entidades no mundo, ainda que inobserváveis. Nesse contexto, nossa análise revelou que nos livros não há abertura interpretativa quanto à realidade da função de onda Ψ , predominando a concepção de que o *único* entendimento possível é o de que ela não possui significado físico.

Somente no livro de Atkins e Jones (2001) foram encontrados argumentos para justificar esse entendimento. Primeiramente, são apresentadas duas interpretações distintas em relação à função de onda Ψ :

A abordagem de Schrodinger foi substituir a trajetória precisa da partícula por uma **função de onda**, representada pela letra grega Ψ (psi), que nos diz qual é a probabilidade da partícula ser encontrada em uma posição particular. Quando calculamos Ψ , podemos prever a probabilidade da partícula ser encontrada em uma dada região do espaço. [...] Para interpretar o significado de uma função de onda, usamos a sugestão dada mais tarde pelo físico alemão Max Born. Na **interpretação de Born** da função de onda, a probabilidade de encontrar uma partícula em uma região é proporcional ao *quadrado* de Ψ . Para ser mais preciso, Ψ^2 é uma **densidade de probabilidade** no sentido de que, para obter a probabilidade de que a partícula esteja uma pequena região do espaço, multiplicamos Ψ^2 pelo volume da região. (ATKINS & JONES, 2001, p. 143)

Como visto na citação acima, os autores apontam que, atualmente, a interpretação de Born é adotada para o significado da função de onda. Vale destacar que esse é um dos poucos livros que apresenta diferentes interpretações históricas em relação à função de onda. A interpretação de Born é justificada pelo fato de haver, em certos casos, a

possibilidade de a função de onda possuir valor negativo. Atkins e Jones (2001) apresentam o seguinte gráfico para ilustrar o comportamento de duas funções de onda Ψ distintas, uma sem valor negativo e outra com valor negativo, bem como o comportamento exibido pelas funções quando elevadas ao quadrado:

FIGURA 1.16 As duas funções de onda de energia mais baixa (ψ , laranja) para a partícula na caixa e as correspondentes densidades de probabilidade (ψ^2 , azul). As densidades de probabilidade também são mostradas pela densidade do sombreado das bandas.

Figura 3 – Comportamento da função de onda Ψ e de Ψ^2 em Atkins e Jones (2001)

Segundo os autores, “quando tomamos o quadrado da função de onda, o resultado nunca é negativo” (ATKINS & JONES, 2001, p. 146). Em nossa discussão sobre o estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais, observamos que alguns autores afirmam que a função de onda Ψ não possui significado físico pelo fato de apresentar, em certas circunstâncias, o número imaginário i ($\sqrt{-1}$). Porém, Atkins e Jones (2001) não mencionam a componente imaginária da função de onda, indicando, simplesmente, que o valor da função de onda é negativo.

Apenas no livro de Ohlweiler (1967) há menção explícita à componente imaginária de certas funções de onda. No entanto, ainda que indique que a função de onda não possui significado físico, ao mencionar sua componente imaginária Ohlweiler (1967) se preocupa apenas em esclarecer a diferença entre duas notações para Ψ^2 , sem que isso esteja relacionado a uma possível justificativa para rejeitar seu significado físico:

Dado que a função pode ser facilmente imaginária, o mais correto é tomar $\Psi \Psi^*$ ou $|\Psi|^2$ em vez de Ψ^2 , representando Ψ^* o complexo conjugado de Ψ . O complexo conjugado de Ψ obtém-se pela substituição, em todos os termos de Ψ , de $i = \sqrt{-1}$ por $-i$; o produto de uma função complexa por sua função conjugada é sempre real. De qualquer maneira, na maior parte dos problemas concernentes a estados estacionários do elétron em átomo ou moléculas, Ψ é real e, então $\Psi \Psi^*$ é igual a Ψ^2 . (OHLWEILER, 1967, p. 62)

Em resumo, nenhuma discussão de natureza ontológica e epistemológica, ainda que breve, é feita pelos autores a respeito de a função de onda não possuir significado físico, ou seja, não é claro o que os livros pretendem transmitir com essa afirmação: se é a compreensão de que a função de onda não se refere a uma entidade na Natureza (estatuto ontológico); ou se é a compreensão de que, por meio da função de onda, não podemos alcançar a realidade, isto é, sistematizar dados e fazer previsões (estatuto epistemológico); ou, ainda, ambas as possibilidades. Essas questões ficam em aberto para os estudantes.

Após essas considerações preliminares em relação à Mecânica Ondulatória, os autores dos livros de Química Geral introduzem o conceito de orbital.

6.3.2. O orbital entendido como a *densidade de probabilidade*

Os livros de Química Geral analisados podem ser divididos em três grupos quanto ao que é o orbital: orbital corresponde à função de onda Ψ ; orbital corresponde à densidade de probabilidade; e orbital corresponde aos números quânticos. No caso do segundo grupo, nem todos os autores indicam explicitamente a correspondência entre a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , e o conceito de densidade de probabilidade ou distribuição de probabilidade. Em alguns livros desse grupo, só há menção aos termos *densidade de probabilidade* ou *distribuição de probabilidade*, omitindo-se, dessa maneira, a relação que esse conceito possui com a função de onda Ψ . Por isso, criamos dois subgrupos visando distinguir os livros que fazem ou não tal associação com Ψ , alertando que essa distinção foi feita com base nos conteúdos dos capítulos como um todo, e não somente nos enunciados iniciais a respeito do que é um orbital. Na Tabela 6, estão compilados os tipos de definições para o conceito de orbital presentes nos livros, particularmente em seus respectivos capítulos sobre a estrutura da matéria. Mais adiante, se verá que alguns autores atribuem concepções complementares à primeira definição exposta em seus livros.

Tabela 6 – Definições textuais para o conceito de orbital presentes nos livros de Química Geral investigados

Definições textuais para o conceito de orbital	Livros	Nº de Livros
1. Correspondência entre a função de onda Ψ e o orbital	Partington (1950); Pauling (1967); Brady e Humiston (1986); Kotz e Treichel (1998); Brown, LeMay e Bursten (1999); Atkins e Jones (2001).	6

2.			
Correspondência entre a densidade de probabilidade e o conceito de orbital	2a. Com menção a Ψ	Mahan (1970); Pimentel e Spratley (1974); O'Connor (1977); Russell (1981).	4
	2b. Sem menção a Ψ	Hardwick (1965); Sienko e Plane (1968); Quagliano e Vallarino (1979).	3
3. Correspondência entre os números quânticos e o orbital			
		Ohlweiler (1967); Slabaugh e Parsons (1977); Masterton e Slowinski (1978).	3

Em relação ao primeiro grupo da Tabela 6, orbital correspondendo à função de onda Ψ , selecionamos algumas citações representativas:

Schrödinger (1926) supôs que a carga do elétron não está concentrada em uma partícula, mas que se estende por todo o espaço como uma espécie de <nuvem>, cuja densidade é proporcional a Ψ^2 , onde Ψ é uma *função de onda*, ainda que Born (1926) tenha sugerido que Ψ^2 é a probabilidade de encontrar o elétron, considerada como partícula, em uma dada parte do espaço. [...] a função de onda Ψ substituiu, agora, as órbitas eletrônicas de Bohr (PARTINGTON, 1950, p. 328, grifo nosso)

Schrödinger resolveu, matematicamente, uma equação chamada equação de onda. Ele obteve um conjunto de funções matemáticas chamadas **funções de onda** (geralmente representadas pela letra grega, Ψ), que descrevem as formas e as energias das ondas eletrônicas. Cada uma dessas diferentes possíveis ondas é chamada de um orbital (para distinguir das órbitas de Bohr). (BRADY & HUMISTON, 1986, p. 90, 91, grifo nosso)

A solução completa da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio leva a um conjunto de funções de onda e das energias correspondentes às funções. Cada função de onda é um orbital. (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999, p. 126, grifo nosso)

No livro de Partington (1950), não há menção explícita ao termo *orbital* e, como visto na citação acima, nenhuma indicação explícita do significado do orbital. Todavia, a passagem selecionada permite supor que o orbital seja a função de onda, que *substituiu as órbitas de Bohr*. Embora não tenha sido o objetivo principal deste trabalho, também foi observado como a antiga teoria quântica era introduzida nos livros de Química Geral do século XX. Todos os livros apresentam a antiga teoria quântica antes de discutir a Mecânica Quântica, sendo que o modelo atômico de Bohr está presente amplamente nos livros. Os livros didáticos sugerem, e alguns explicitamente, que as órbitas do modelo atômico de Bohr foram substituídas pelo orbital proveniente da Mecânica Ondulatória. Por conta disso, é

razoável supor que tal afirmação, feita em outros livros de Química Geral possa ser atribuída, também, para o livro de Partington (1950).

Este grupo de livros se enquadra no consenso preliminar sobre o estatuto ontológico e epistemológico do orbital, isto é, o de que este se refere à função de onda e esta, por sua vez, descreve o estado de um único elétron em um átomo ou molécula em termos de coordenadas espaciais. Além disso, esse é o entendimento que Robert Mulliken deu ao conceito de orbital. No entanto, existe um dissenso entre os filósofos da ciência no que diz respeito à relação da função da onda com a realidade. Ogilvie (1992; 2011) descreve que a função de onda Ψ é uma equação sem relação com a realidade, ou seja, restrita a um domínio puramente matemático. O grupo de livros em questão não corrobora o entendimento de Ogilvie (1992; 2011), ao afirmarem que uma entidade da Natureza, o elétron, é descrita por uma equação matemática, a função de onda Ψ .

A compreensão que os livros possuem em relação à função de onda Ψ se aproxima do entendimento proposto por Ostrovsky (2005), para quem os orbitais não são apenas constructos matemáticos, mas estão apoiados em informações físicas e representam propriedades físicas objetivas e aspectos qualitativos da Natureza, tais como o comportamento do elétron em torno do núcleo.

Observa-se, assim, uma dificuldade quando verificamos que os livros de Kotz e Treichel (1998), Brown, LeMay e Bursten (1999) e Atkins e Jones (2001), afirmam, antes de introduzir o conceito de orbital, que a função de onda Ψ *não possui significado físico*. Mais adiante, esses livros enunciam que o orbital se refere à função de onda Ψ , como visto, por exemplo, na citação anterior de Brown, LeMay e Bursten (1999). Desse modo, é possível deduzir, ainda que tal consequência lógica não seja explicitada nos livros, que o orbital não possui significado físico. Novamente, reiteramos que não há qualquer esclarecimento por parte dos livros quanto ao significado ontológico e epistemológico da afirmação *não possuir significado físico*, ainda que seja dirigida nos livros apenas à função de onda Ψ . Como dito anteriormente, essa compreensão da função de onda Ψ é tributária da interpretação positivista da Mecânica Quântica. Apesar de os livros endossarem essa interpretação, ao enunciarem o conceito de orbital como a função de onda Ψ , observa-se que as descrições abarcam considerações ontológicas e epistemológicas: o elétron e a descrição do seu comportamento. Assim, apresenta-se uma dificuldade ao estudante quando justapomos, de um lado, a afirmação de que a função de onda não possui significado físico e, do outro, a descrição do que é um orbital. O problema em não se delimitar e compreender a ontologia (a Natureza e as coisas que a constituem) e a epistemologia (nossas teorias e modelos que buscam descrever e explicar a Natureza e as coisas que a constituem) tem como consequência esse paradoxo identificado nos livros.

Outra característica desse grupo de livros é a indicação, ou sugestão, de que a função de onda Ψ descreve o estado do elétron. Mais adiante, observaremos que no âmbito das categorias *representação icônica* e *simbólica do orbital* há a sugestão, ainda que de diferentes naturezas para cada uma delas, de que o orbital é uma entidade, não um estado.

Mulder (2010; 2011) é enfático quanto à natureza do orbital: este é um estado, não uma entidade. Este grupo de livros descreve que a função de onda fornece as condições do elétron, particularmente, o seu comportamento no espaço. Essa compreensão do orbital tem duas consequências: o orbital é uma propriedade do elétron e, assim, não tem existência independente; dessa maneira, não há sentido em se levantar questões ontológicas a respeito da existência do orbital.

O segundo grupo da Tabela 6, orbital correspondendo à densidade de probabilidade, foi dividido em dois subgrupos: com menção a Ψ ; e sem menção a Ψ . Associações explícitas entre a densidade de probabilidade e a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , e sua relação com a função de onda Ψ , são exemplificadas abaixo:

Estas distribuições espaciais (Fig. 12.11 e 12.12) são os correspondentes das trajetórias orbitais que descrevem os movimentos clássicos dos planetas em um sistema solar. Se imaginarmos um sistema solar que pudesse ser encolhido tanto quanto quiséssemos, quando o sol se reduzisse à massa de um próton, a trajetória orbital se tornaria a distribuição de probabilidade quântica expressa por Ψ^2 . Devido a esta correspondência, os cientistas se referem a uma distribuição de probabilidade como um “orbital”. (PIMENTEL & SPRATLEY, 1974, p. 374, grifo nosso)

Estes gráficos de probabilidade tridimensional de distribuição eletrônica são chamados de orbitais. Eles substituíram as órbitas eletrônicas no modelo atual do átomo, e forneceram uma base para a explicação das propriedades de muitos elementos e compostos. Os orbitais podem ser imaginados como “nuvens de carga” criadas por elétrons em movimento. Seu tamanho e forma dependem do estado energético do elétron. A descrição probabilística de um orbital é um resultado matemático da equação de Schrödinger (p. 48) e está relacionada à função Ψ^2 (O’CONNOR, 1977, p. 51, grifo nosso)

O segundo subgrupo diz respeito aos livros que descrevem o orbital como correspondendo à densidade de probabilidade, mas sem explicitar que essa pode ser entendida como a função de onda Ψ elevado ao quadrado, Ψ^2 . Esse subgrupo de livros não menciona, em sua discussão sobre a Mecânica Ondulatória, a existência da função de onda Ψ .

Podemos construir um mapa da região na qual se pode, normalmente, encontrar o elétron, fazendo as marcas de densidade de probabilidade, a qual, considerando, em três dimensões, terá a aparência de uma pequena nuvem. Essas nuvens representam o espaço ocupado pelos vários orbitais e têm formas características, mas não têm limites claramente definidos. (HARDWICK, 1965, p. 138, grifo nosso)

Para reduzir ao mínimo qualquer confusão possível entre as idéias velhas e as novas, foi introduzido o termo orbital, significando um nível de energia

quando associado a uma dada distribuição de probabilidades eletrônicas.
(SIENKO & PLANE, 1968, p. 63)

O termo *orbital* é usado para indicar, de modo breve, a distribuição espacial que um elétron de um dado nível de energia tem em torno do núcleo.
(QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, p. 230, grifo nosso)

Assim como se verificou no livro de Pauling (1967), o livro de Hardwick (1965) não define explicitamente o conceito de orbital. Na citação acima, Hardwick (1965) visa, inicialmente, discutir as representações icônicas dos orbitais. Nesse caso, o conceito de orbital é introduzido ao leitor concomitantemente à sua representação, ou seja, seu entendimento é construído desde o início tendo em vista um ícone. O'Connor (1977) introduz o conceito de orbital do mesmo modo.

Considerando esses dois subgrupos como um único grupo, conclui-se que sete livros compreendem o orbital como a densidade de probabilidade. Desse grupo de livros, Mahan (1970), Pimentel e Spratley (1974), e Russell (1981) afirmam que a função de onda Ψ não possui significado físico. Nessa circunstância, a compreensão do orbital como se referindo ao conceito de densidade de probabilidade (Ψ^2), uma região no espaço onde é mais provável encontrar o elétron, tal como exposto por esses livros, ampara-se, em certa medida, na dificuldade que eventualmente emergiria ao se associar o orbital com a função de onda Ψ , considerada sem significado físico. Afinal, o emprego que os químicos dão a esse conceito sugere realizações concretas, tal como na manipulação dos orbitais com formas e orientações bem definidas, no âmbito da explicação da ligação química. Dessa maneira, a atribuição do orbital como se referindo à densidade de probabilidade, em detrimento de sua atribuição como a função de onda Ψ , visa evitar, em nosso entendimento, uma possível dificuldade decorrente dessa segunda opção – como aquele presente no primeiro grupo da Tabela 6, no qual se atribui, inicialmente, uma natureza antirrealista para o conceito de orbital, mas, posteriormente, os empregos dados ao conceito sugerem, ao contrário, sua realidade. Diante disso, o orbital entendido como a densidade de probabilidade sugere uma interpretação realista do conceito, evitando a dificuldade aqui apontada. Essa análise também é válida para os demais livros do grupo, pois, embora não afirmem explicitamente que a função de onda não possui significado físico, parece razoável supor que essa compreensão esteja implícita.

Como destacam Labarca e Lombardi (2010) e Mulder (2011), a compreensão do orbital como a densidade de probabilidade é amplamente disseminada na Química. Todavia, enquanto Labarca e Lombardi consideram essa compreensão por partes dos químicos legítima, Mulder a identifica como um equívoco.

Labarca e Lombardi (2010) descrevem que o principal objeto de investigação dos químicos são as moléculas, cuja característica central é a sua forma (estereoquímica),

explicada pelo arranjo espacial dos átomos e pela forma e natureza direcional dos orbitais. Nessa perspectiva, a única compreensão que privilegia o conteúdo espacial é a oriunda da definição do orbital como uma região na qual é mais provável se encontrar o elétron. Segundo Labarca e Lombardi (2010), essa interpretação conduz a uma concepção realista dos orbitais, diferentemente do entendimento antirrealista comumente identificado nos livros de Química Geral em relação à função de onda, sobre a qual se afirma não ter significado físico. Como visto, os livros adotam, ainda que de maneira irrefletida, a interpretação positivista para a função de onda, mas tendem a romper com ela ao atribuírem uma outra conceituação para o orbital.

Além disso, há uma descontinuidade qualitativa entre a compreensão fornecida pela Mecânica Quântica e aquela empregada pelos químicos. Os químicos concebem as moléculas como entidades individuais, ou seja, suas partes – núcleo e elétrons – são suprimidas pelo todo – a molécula –; e as descrevem semi-classicamente e probabilisticamente, por meio da aproximação de Born-Oppenheimer. Os argumentos de Labarca e Lombardi (2010) são apoiados por Woolley (1978), que aponta que descrições mecânico-quânticas puras não fazem uso de tal aproximação, não atribuindo, assim, estruturas espaciais bem definidas para a molécula.

Do ponto de vista de Labarca e Lombardi (2010), ambas as compreensões do orbital – função de onda e densidade de probabilidade – podem coexistir ontologicamente e epistemologicamente, implicando em dois tipos de orbitais: os *orbitais da Química*, entendidos como a *densidade de probabilidade* e de cunho *realista*; e os *orbitais da Mecânica Quântica*, particularmente os oriundos da interpretação positivista, entendidos como a *função da onda Ψ* e de cunho *antirrealista*.

Por outro lado, Mulder (2010; 2011) encara essa conceituação do orbital sob uma perspectiva distinta. Primeiramente, nota que a função de onda Ψ e o conceito de densidade de probabilidade estão intimamente relacionados, dado que a primeira origina a segunda. Essa relação estreita entre elas dificulta sua distinção. Isso se observa, por exemplo, no trabalho de Niaz e Fernández (2008), os quais investigaram 55 livros de Química Geral voltados para o Ensino Superior, concluindo que nenhum deles distingue satisfatoriamente entre função de onda e densidade de probabilidade, provavelmente, por conta dessa relação íntima entre uma e outra. Segundo Mulder (2010; 2011), o problema dessa ambiguidade em relação ao orbital é gerar diferentes compreensões sobre o que é um orbital: enquanto a função de onda Ψ remete a um estado quântico, o conceito de densidade de probabilidade remete a uma entidade. Para Mulder (2010; 2011) esta última compreensão é um equívoco, pois o orbital é uma propriedade do elétron e não possui existência independente.

Os livros do terceiro grupo da Tabela 6 sugerem a correspondência do orbital com um dado número quântico, ou mesmo, um conjunto de números quânticos: n (número quântico principal); l (número quântico de momento angular orbital); e m_l (número quântico magnético). Nesse grupo, o significado atribuído ao orbital pelos livros é mais difícil de ser verificado, pois permanece implícito, como nas citações abaixo:

A equação de Schrodinger mostra, pois, que o estado do elétron no átomo de hidrogênio é expresso em termos de três números quânticos – n , l e m_l – que correspondem aos três graus de liberdade de movimento no espaço. [...] Cada combinação dos três números quânticos corresponde a um estado definido do elétron ou orbital atômica. (OHLWEILER, 1967, p. 64, grifo nosso)

Soluções da equação de onda de Schroedinger que nos interessam, são aquelas que se utilizam de três números quânticos e designados por n , l e m . Esses números são necessários para a resolução da equação de onda. Cada número quântico pode ter muitos valores, e cada combinação permitida desses valores oferece uma solução para a equação de onda. Estas combinações descrevem certas características do elétron no átomo de hidrogênio. [...] Esse conjunto de números quânticos, [...], corresponde a um orbital do elétron. [...] O orbital de um elétron define a energia e características da distribuição espacial do elétron (SLABAUGH & PARSONS, 1977, p. 31)

[...] cada nível eletrônico em um átomo inclui um ou mais *subníveis* ou subcamadas. Os subníveis denominam-se em função do número quântico secundário, l . A geometria da nuvem eletrônica associada com um elétron é determinada por l . [...] cada subnível contém um ou mais orbitais, cada qual designado por um terceiro número quântico m_l . Este número quântico está associado com a orientação da nuvem eletrônica em relação a uma direção dada, usualmente aquela que é imposta por um forte campo magnético. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 106-107)

As duas primeiras citações evidenciam diretamente a correspondência entre orbital e números quânticos. Na terceira citação, a associação entre orbital e os números quânticos é sutil, pois apenas se indica que, para cada valor de número quântico magnético, m_l , há um orbital.

A discussão dos números quânticos está presente, ainda que diferindo em profundidade e abordagem, em todos os livros investigados deste período. Essa discussão se faz necessária para que, posteriormente, as configurações eletrônicas dos átomos e íons sejam determinadas, de modo a fornecer informações, como, por exemplo, quanto ao número de elétrons de valência de uma dada espécie química. Destacamos que somente três livros compreendem o orbital como se referindo aos números quânticos.

Como podemos observar em algumas das citações acima, referentes aos três grupos da Tabela 6, nem todos os autores, particularmente Partington (1950) e Masterton e Slowinski (1978), definem, explicitamente, o conceito de orbital no capítulo em que o mesmo

é introduzido pela primeira vez. Dentre esses autores, apenas Partington (1950)⁴⁹ não faz uso desse termo. Masterton e Slowinski (1978), embora não definam claramente o que entendem como um *orbital*, utilizam o termo *orbital* para designar representações simbólicas e representações icônicas, como veremos mais adiante. Somente no final do livro há uma definição explícita para o conceito de orbital, na seção *glossário*:

Orbital – uma nuvem eletrônica com um estado de energia caracterizado por valores determinados dos números quânticos, n , l e m_l ; tem no máximo capacidade para dois elétrons com spins opostos; muitas vezes associado com uma região particular do átomo. Exemplo: em um átomo os elétrons do orbital $2p_x$ estão em duas nuvens tangentes no núcleo concentradas ao longo do eixo x . (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, 569, grifo nosso)

Na citação acima, nota-se uma multiplicidade de significados para o orbital: nível de energia, associado a números quânticos; e uma região particular do átomo, a qual podemos supor que seja referente à densidade de probabilidade máxima de se encontrar elétrons. A primeira compreensão, orbital determinado pelos números quânticos, vai ao encontro do que foi transmitido implicitamente no capítulo sobre a estrutura da matéria. Enquanto que a segunda compreensão, como será exposto na categoria representação icônica do orbital, é amplamente empregada para subsidiar o entendimento das imagens apresentadas como orbitais.

A análise do conceito de orbital efetuada na Tabela 6 levou em consideração a primeira vez em que o conceito é definido pelos livros de Química Geral. Contudo, constatamos que alguns autores, particularmente os do grupo 1 da Tabela 6, sugerem, em outros pontos de seus textos, outros significados para o conceito de orbital. Tais autores definem, inicialmente, o conceito de orbital como a função de onda Ψ , mas, posteriormente, relacionam o orbital com a densidade/distribuição de probabilidade:

Cada orbital descreve uma certa distribuição de densidade de elétrons no espaço, conforme a densidade de probabilidade. (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999, p. 126, grifo nosso)

[...] a localização de um elétron em um átomo não pode ser descrita em termos de uma posição precisa, mas sim em termos da probabilidade de o encontrarmos em algum lugar do espaço definido pelo seu orbital. (ATKINS & JONES, 2001, p. 231, grifo nosso)

Portanto, pelas citações acima, e em conjunto com os resultados expostos anteriormente, é possível inferir que há uma predominância entre os livros de Química Geral em conceber ou, no mínimo, sugerir, que o orbital se refere à densidade de probabilidade.

⁴⁹ Partington (1950) recorre à palavra *órbita* para descrever o que considerariamos como orbital. Por exemplo, “o nitrogênio tem três elétrons p e estes podem ocupar isoladamente as órbitas p_x , p_y e p_z ” (PARTINGTON, 1950, p. 331, grifo nosso). Apesar dessa referência às órbitas, na discussão mecânico quântica da ligação na molécula de H_2 , Partington (1950) menciona a “parte orbital da função de onda do H_2 ” (ibid., 329), se referindo à componente radial da função de onda.

O apelo a esse entendimento do orbital se destacará nas representações icônicas desse conceito, como veremos mais adiante. Contudo, nota-se, também, nos três modos de compreensão do conceito de orbital delimitados na Tabela 6, que em oito dos dezesseis livros analisados, um significado adicional acompanha a definição: o orbital como um nível de energia⁵⁰. Os demais livros, que não fazem essa consideração textualmente ao introduzir o conceito de orbital, posteriormente atribuem esse significado, quando descrevem que o número quântico principal n determina o nível de energia do orbital e, também, ao exibir diagramas de níveis de energia de orbitais. Mais adiante, na discussão da categoria *representação simbólica do orbital*, observaremos que tais diagramas estão presentes em quase todos os livros investigados. Por consequência, a concepção do orbital como um nível de energia é, em conjunto com uma ou mais concepções contidas na Tabela 6, amplamente difundida nos livros de Química Geral do século XX. Esse aspecto será discutido no âmbito da categoria *representação simbólica do orbital*.

6.4. Representação icônica do orbital

A segunda categoria delineada por esta pesquisa se refere às *representações icônicas do orbital*, cuja característica semiótica reside em representar o objeto (neste caso, o orbital) por meio de um signo em função das similaridades na aparência entre signo e objeto. Para tanto, a representação reflete qualidades selecionadas do objeto. No caso do orbital, uma das qualidades frequentemente selecionada para representar esse conceito diz respeito às suas formas características.

As imagens que representam os orbitais estão presentes em todos os livros investigados, e são prontamente reconhecidas pelos químicos. Ao longo da segunda metade do século XX, tais imagens cresceram em quantidade, por conta do aumento do espaço dedicado à discussão da estrutura da matéria e, principalmente, pela discussão da ligação química.

6.4.1. Representações de orbitais como regiões de densidade de probabilidade máxima: entidades independentes do elétron?

Sumarizamos, na Tabela 7, as compreensões transmitidas pelos livros didáticos de Química Geral em relação ao que as imagens rotuladas ou descritas como orbitais correspondem, tendo em vista a Mecânica Ondulatória.

⁵⁰ Esse significado adicional é apresentado textualmente nas citações de: Sienko e Plane (1968); O'Connor (1977) Slabaugh e Parsons (1977); Masterton e Slowinski (1978); Russell (1981); Brady e Humiston (1986); Kotz e Treichel (1998); Brown, LeMay e Bursten (1999).

Tabela 7 – Caracterizações das imagens designadas como orbitais presentes nos livros didáticos de Química Geral

Caracterização da imagem designada como orbital		Livros	Nº de Livros
1. A imagem representa a densidade de probabilidade máxima	1a. Com menção a Ψ^2	Mahan (1970); O'Connor (1977); Masterton e Slowinski (1978); Russell (1981); Brady e Humiston (1986); Pimentel & Spratley (1974); Kotz e Treichel (1998); Atkins e Jones (2001).	8
	1b. Sem menção a Ψ^2	Hardwick (1965); Sienko e Plane (1968); Slabaugh e Parsons (1977); Quagliano e Vallarino (1979).	4
2. Ambiguidade quanto ao que é representado pela imagem: função onda Ψ ou densidade de probabilidade		Ohlweiler (1967); Brown, LeMay e Bursten (1999).	2
3. A imagem representa a função de onda Ψ		Partington (1950).	1
4. Não há maiores esclarecimentos quanto ao que a imagem representa		Pauling (1967).	1

A Tabela 7 evidencia que a maioria dos livros investigados concebe as representações icônicas dos orbitais como a densidade de probabilidade máxima, baseada em Ψ^2 . De modo análogo ao exibido na Tabela 6, distinguimos na tabela acima entre os livros que identificam explicitamente o conceito de densidade de probabilidade com a função de onda elevado ao quadrado, Ψ^2 . Essa distinção permite vislumbrar que as imagens dos orbitais se referem a uma equação matemática particular, ainda que a maioria dos livros não apresente essas equações matemáticas aos estudantes, como veremos mais adiante na categoria *representação simbólica do orbital*.

Vale notar que, na categoria *base conceitual do orbital*, exposta anteriormente (Tabela 6), há uma divisão entre os livros que descrevem, de um lado, que o orbital corresponde à função de onda Ψ , e, do outro, que o orbital corresponde à densidade de probabilidade. Contudo, não existe essa divisão na categoria *representação icônica do*

orbital, havendo a caracterização de que as imagens dos orbitais representam a densidade de probabilidade, ou, mais precisamente, à densidade de probabilidade máxima.

A predominância das representações icônica dos orbitais como a densidade de probabilidade máxima reforça a opinião de que os livros compreendem de maneira particular esse conceito. Como esclarecem Wang e Schwarz (2000), tanto a função de onda quanto o conceito de densidade de probabilidade podem ser representados graficamente (ou, nos nossos termos, representados iconicamente) por superfícies de contorno, ou em duas dimensões por mapas de linha de contorno. Não haveria, a princípio, diferenças importantes entre essas representações, de modo que ambas seriam válidas. No entanto, a predominância de uma delas nos livros de Química Geral sugere uma valoração diferente entre elas, proveniente das consequências ontológicas e epistemológicas de cada representação e do entendimento do que é um orbital para os livros de Química Geral. Ontologicamente, retoma-se a questão indicada pelos livros de que a função de onda Ψ não possui significado físico, implicando em representações do orbital sem significado físico. Diante disso, os livros recorrem à compreensão que empresta significado físico ao orbital, isto é, a densidade de probabilidade.

Como apontado no **Capítulo 4** – Semiótica Química, a não existência de um objeto na Natureza, tal como os livros se referem à função de onda Ψ , não impossibilitaria a produção de um signo para ele. Não obstante, a função de onda abarcaria outros aspectos não contemplados pela representação do conceito de densidade de probabilidade, como, por exemplo, as fases da onda e, também, como veremos na seção 6.4.4., o fato de que diferentes formas para os lobos dos orbitais são produzidas quando se representa a função de onda ou a densidade de probabilidade. Diante disso, o emprego de uma multiplicidade de signos permite compreender o objeto estudado em diversas dimensões, levando o estudante a construir uma compreensão mais elaborada do conceito. Mas, para isso, é preciso destacar os aspectos ressaltados em cada representação, as semelhanças e diferenças entre as representações, e os objetivos almejados no uso de cada uma delas (SOUZA, 2012). Esses esclarecimentos, entretanto, não estão presentes, ou não são suficientemente reforçados pelos livros de Química Geral.

No que diz respeito à natureza das imagens dos orbitais, presentes no primeiro grupo de livros da Tabela 7, observa-se que, de maneira geral, essas imagens são de dois tipos: (1) figuras difusas, proveniente da analogia do comportamento do elétron (como uma nuvem eletrônica), com gradientes de tonalidade de cor, indicando que quanto maior a intensidade do sombreamento, maior a probabilidade de se encontrar o elétron; e (2) figuras com superfícies contínuas e uniformes, as quais limitam uma probabilidade arbitrária de se encontrar o elétron, geralmente indicada pelos livros como sendo de 95%. Estas duas

formas de representação coexistem na maioria dos livros analisados, e ambas são caracterizadas como representações da densidade de probabilidade máxima. Contudo, as primeiras são, na maioria dos livros, introduzidas antes das figuras com superfícies contínuas. Além disso, esses diferentes tipos de imagens dos orbitais não se restringem ao primeiro grupo da Tabela 7, pois estão presentes, também, nos demais livros.

Na Figura 4, compilamos algumas das representações de orbitais como figuras difusas, presentes na maioria dos livros⁵¹:

Figura 4 – Representações de orbitais através de figuras difusas: **(a)** orbital *s* (HARDWICK, 1967); **(b)** orbital *s* (SLABAUGH & PARSONS, 1977); **(c)** orbital *p* (BRADY & HUMISTON, 1986); **(d)** orbital *s* (KOTZ & TREICHEL, 1998)

As seguintes citações exemplificam como essas imagens são descritas pelos livros de Química Geral:

O modelo, segundo a Mecânica Ondulatória, pode ser visualizado como um objeto tridimensional. Fazendo-se a representação gráfica da probabilidade de encontrar o elétron, num determinado instante, em uma dada região do espaço, ao redor do núcleo, escurecendo cada região, proporcionalmente a esta probabilidade, ter-se-ia uma figura semelhante a uma esfera difusa [Figura 4 **(b)**]. Esse modelo, chamado nuvem eletrônica, será mais denso próximo do núcleo e se estenderá para fora indefinidamente. [...] É difícil desenhar esferas difusas. Consequentemente, a fim de representar um átomo, desenha-se habitualmente uma linha envolvendo uma região onde pode se encontrar um elétron, digamos, 95% do tempo [Figura 4**(b)**]. (SLABAUGH & PARSONS, 1977, p. 32, grifo nosso)

⁵¹ Embora esta dissertação apresente somente representações icônicas de orbitais *s* e *p*, na maioria dos livros são representados, também, orbitais *d* e, em um único livro, orbitais *f*. As representações para os orbitais *d* e *f* não foram contempladas na presente investigação, pelo fato de que os orbitais *s* e *p* recebem maior atenção pelos livros, enquanto os demais orbitais são apenas ilustrados.

Como imaginar o orbital? [...] Se admitirmos por um instante que o elétron é uma pequena partícula e não uma onda, e se pudermos fotografar o elétron 1s em intervalos de segundo, durante alguns milhares de segundo, a foto das imagens superpostas seria parecida com o diagrama da Fig. 7.16a [Figura 4 (d)]. A figura é semelhante a uma nuvem de pontos, e os químicos denominam a essas representações de orbitais como nuvem de elétrons. O fato de a densidade de pontos ser maior nas vizinhanças do núcleo (nuvem de elétrons é a mais densa nas proximidades do núcleo) indica que o elétron se encontra com maior frequência nesta vizinhança (ou, ao contrário, que é menos provável ser encontrado muito longe do núcleo). Na linguagem da Mecânica Quântica, dizemos que a maior probabilidade é a de se encontrar o elétron num pequeno volume do espaço em torno do núcleo, enquanto é menor a probabilidade de se encontrar o elétron num volume afastado. [...] A imagem visual da Figura 7.16a [Figura 4 (d)] é de uma nuvem cuja densidade é pequena a grandes distâncias do centro; não há fronteira nítida além da qual o elétron nunca se encontra. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 217, 218, grifo nosso)

Descrições como a de Slabaugh e Parsons (1977) acerca da imagem do orbital, destacando representar a probabilidade máxima de se encontrar o elétron, ocorrem na maioria dos livros investigados. A descrição feita por Kotz e Treichel é de cunho mais concreto, ainda que hipotético, pois sugere ao estudante que imagine a possibilidade de *fotografar* um elétron (ou seja, descreve um *experimento de pensamento*), e se encontra em poucos livros. Ainda que resulte de um experimento de pensamento, essa imagem possui uma natureza mais *indicial*, pois conduz hipoteticamente ao objeto representado. No entanto, o que se destaca aqui é a consideração de Mulder (2010; 2011) de que o orbital é uma propriedade do elétron, de maneira que essas representações nos conduzem ao comportamento do elétron ao longo do tempo, e não ao orbital como uma entidade independente.

Outro ponto destacado nessas duas citações, e comum nos demais livros, é que há uma probabilidade finita de se encontrar o elétron mesmo quando sua distância ao núcleo tende ao infinito. Essa característica acarreta a impossibilidade de se representar no papel um objeto que tende a dimensões infinitas. Assim, os livros de Química Geral destacam que as representações dos orbitais ali expostas compreendem regiões onde a probabilidade de se encontrar o elétron é, segundo a maioria dos livros, de 95%, designadas como probabilidades máximas. Desse modo, embora as representações dos orbitais como nuvens eletrônicas sejam de natureza difusa, dificultando, conseqüentemente, a delimitação de formas bem definidas para o orbital, as imagens veiculadas pelos livros didáticos tendem a atribuir a ele regiões delimitadas.

Posteriormente, os livros de Química Geral introduzem as representações de orbitais por superfícies limites, isto é, superfícies contínuas e uniformes, objetivando atribuir dimensões e formas bem delimitadas para os orbitais, como mostrado na Figura 5.

Figura 5 – Representações de orbitais por superfícies limites: **(a)** orbitais p (MAHAN, 1970); **(b)** orbital s (O'CONNOR, 1977); **(c)** orbital s (RUSSELL, 1981); **(d)** orbital p (BRADY & HUMISTON, 1986); **(e)** orbital s (ATKINS & JONES, 2001)

As seguintes citações exemplificam como os livros de Química Geral introduzem essas representações para os orbitais:

Maneira algo mais simples de representar a forma dum orbital é desenhar uma única superfície, ao longo da qual a probabilidade de encontrar um elétron é constante [...]. A solução para a equação de Schrödinger mostra que, qualquer que seja o número quântico principal, todos os orbitais com $l=0$, todos os orbitais s , têm forma esférica. Assim, a probabilidade de achar um elétron num orbital s , nunca depende dos valores das coordenadas angulares, mas somente da distância do núcleo. Isto não é verdadeiro para orbitais p , como se vê pela Fig. 10.14 [Figura 5 **(a)**]. As superfícies de $|\Psi^2|$ constante são dois lobos esferoidais, com o núcleo localizado entre eles. (MAHAN, 1970, p. 323, grifo nosso)

Uma outra maneira de descrever a distribuição da densidade de probabilidade é construir uma superfície (em três dimensões), na qual todo ponto possui o mesmo valor de Ψ^2 . Para o elétron num orbital $1s$ tal superfície é uma esfera, como aparece na Fig. 6-16 [Figura 5 **(c)**]. [...] Estas superfícies de densidade de probabilidade constante, Ψ^2 , são chamadas *superfícies limites* e geralmente são construídas de modo amplo, para que incluam uma grande porcentagem, digamos 90 por cento, da carga eletrônica. Em outras palavras, a probabilidade que o elétron tem de se encontrar *dentro de algum lugar* na esfera é de 90 por cento. (RUSSELL, 1981, p. 161, 162, grifo nosso)

Poucos livros discutem, ainda que brevemente, as limitações e possibilidades da representação dos orbitais como superfícies limites (ou superfícies de contorno):

Há muitas ideias falsas sobre as imagens desse tipo. É preciso entender que elas não correspondem à realidade. O núcleo fica envolto por uma “nuvem de elétrons”, e não por uma superfície impenetrável que “contém” os elétrons. O elétron, também, não se distribui uniformemente no volume encerrado pela superfície; ao contrário, é mais provável que se encontre nas vizinhanças do núcleo. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 218, grifo nosso)

Forma bastante usada de representar os orbitais é a de representar uma superfície que envolve uma parte determinada, por exemplo, 90%, da densidade total de elétrons do orbital. Para os orbitais s essas superfícies de contorno são esferas. Embora se percam, com essa representação, detalhes da densidade de elétrons no interior da superfície, esta não é uma desvantagem séria. No caso de discussões qualitativas, os aspectos mais importantes dos orbitais são os respectivos tamanhos e formas. Estes aspectos ilustram-se bastante bem pelas representações de contorno. (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999, p. 128,129, grifo nosso)

Kotz e Treichel (1998) esclarecem que a superfície contínua não é uma superfície concreta (real) sobre a qual a densidade de elétrons se distribui uniformemente, mas que o modo de representação escolhido é mais fácil de ser desenhado, ainda que seja uma representação menos fiel do orbital. Desse modo, esse livro sugere que a representação do orbital pela nuvem eletrônica é mais fiel à realidade. Por outro lado, Brown, LeMay e Bursten (1999) destacam os principais aspectos dessas representações: o tamanho e a forma do orbital. Estes aspectos são de suma importância nas discussões posteriores dos livros de Química Geral: o primeiro para discutir propriedades periódicas, tais como raio atômico, energia de ionização, etc.; enquanto que o segundo evidencia a natureza direcional do orbital, subsidiando o entendimento, ainda que aproximado para certas moléculas, das geometrias moleculares, no âmbito da ligação química.

A impossibilidade de se representar no papel um objeto que tende a dimensões infinitas leva os livros de Química Geral a recorrerem a delimitações arbitrárias do tamanho da nuvem eletrônica, como mencionado anteriormente. No entanto, representações difusas não são fáceis e nem rápidas de serem reproduzidas em atividades de lápis e papel. Observa-se que poucos são os livros que esclarecem, tal como Mahan (1970) na citação acima, que o emprego das representações dos orbitais por superfícies limites, em detrimento das representações por nuvens eletrônicas, se justifica por aquela ser mais fácil de ser desenhada, evidenciando, portanto, um caráter utilitário dessas representações nas atividades de lápis e papel. Além disso, o recurso a esse modo de representação do orbital enfatiza as principais características que os livros de Química Geral e, de maneira mais ampla, os químicos, veem no orbital: sua forma e natureza direcional.

Assim, nota-se que são poucos os livros de Química Geral que tecem comentários epistemológicos sobre as representações dos orbitais por superfícies limites. Mesmo os que o fazem são insatisfatórios na descrição dos significados das imagens exibidas. Questões

como a própria estética das imagens são negligenciadas pelos autores, como, por exemplo, na Figura 5, na qual diferentes texturas e intensidades das cores são utilizadas na representação de um mesmo orbital. Antes de se depararem com essas imagens, os estudantes foram introduzidos às imagens dos orbitais por nuvens eletrônicas, nas quais a intensidade do sombreamento apresentava um significado físico, isto é, maior intensidade representava maior probabilidade de se encontrar o elétron em uma dada região. Todavia, nas representações dos orbitais por superfícies limites, as diferentes intensidades de sombreamento não possuem qualquer significado físico, sendo, meramente, um recurso estético para sugerir tridimensionalidade. Apesar disso, nenhum esclarecimento é exposto pelos autores a esse respeito.

As descrições das superfícies limites também revelam um indício para atribuir ao orbital um caráter independente em relação ao elétron. Essas descrições indicam que o objeto envolvido é o elétron, porém, a citação de Russell (1981), por exemplo, afirma o seguinte: *o elétron num orbital 1s*. Essa designação é comumente encontrada, como veremos mais adiante, na *representação simbólica do orbital*, particularmente nas suas representações por *traços e setas* e, por sua vez, no preenchimento dos diagramas de orbitais com elétrons, em que se sugere uma existência independente para os orbitais. Nota-se, assim, uma fusão de compreensões oriundas de cada representação do orbital, provavelmente pela falta de explicitação dos aspectos fundamentais de cada representação, das diferenças entre elas e dos objetivos de seu uso.

Observa-se que as representações dos orbitais por superfícies limites predominam nos livros de Química Geral, principalmente em discussões sobre ligação química, como podemos observar na figura abaixo, em que se manipula no papel a sobreposição de orbitais no âmbito da teoria de ligação de valência:

Figura 6 – Representações dos orbitais por superfícies limites na discussão da ligação química: **(a)** sobreposição de orbitais p na molécula de N_2 (OHLWEILER, 1967); **(b)** sobreposição de um orbital $1s$ do H com um orbital $2p$ do flúor (BRADY & HUMISTON, 1986); **(c)** sobreposição de um orbital $1s$ do H com um orbital sp^3 do C (KOTZ & TREICHEL, 1998); **(d)** sobreposição de um orbital $1s$ do H com um orbital $1s$ de outro H, acompanhada da representação das funções de onda isoladas e combinadas (ATKINS & JONES, 2001).

Este tipo de representação é amplamente utilizada pelos livros didáticos de Química Geral para o Ensino Superior no século XX, variando de um livro a outro na estética da imagem (cores utilizadas, textura da superfície, etc.). Embora a maioria das imagens acima seja exibida na discussão da teoria da ligação de valência (TLV), observa-se que a representação dos orbitais na teoria de orbitais moleculares (TOM) também ocorre por meio de superfícies limites.

Assim como Mulder (2010), consideramos que as representações dos orbitais, principalmente por meio de superfícies limites, sugerem que os orbitais são entidades independentes do elétron. Embora as descrições textuais não sejam categóricas em atribuir uma existência independente para os orbitais, suas representações são persuasivas quanto a isso, pois possuem superfícies uniformes e formas bem definidas, cujos contornos, de natureza arbitrária, ocluem o elétron e sugerem um papel secundário para ele. Outro elemento de persuasão é o caráter concreto sugerido por essas representações no âmbito da ligação química.

Além das representações dos orbitais já descritas, nos livros de Kotz e Treichel (1998) e Atkins e Jones (2001), outra forma de representação das moléculas, até então não

observada nos livros, começa a ter espaço: a representação por meio de um potencial eletrostático.

Figura 7 – Representação de orbitais através do potencial eletrostático: **(a)** íon hidrônio, H_3O^+ (KOTZ & TREICHEL, 1998); **(b)** íon nitrato, NO_3^- (ATKINS & JONES, 2001)

Atkins e Jones (2001) descrevem do seguinte modo o significado de tais representações:

Uma imagem obtida em um computador gráfico, do íon nitrato, mostra três regiões equivalentes de densidade eletrônica (17) [Figura 7 (b)]. A imagem é um “gráfico do potencial eletrostático”, no qual as regiões de carga líquida negativas são mostradas em vermelho e as regiões de carga líquida positivas são mostradas em azul. As regiões em vermelho representam regiões com uma alta densidade de elétrons; nas regiões em azul, a carga nuclear pode ser observada, pois a densidade eletrônica é relativamente baixa. (ATKINS & JONES, 2001, p. 223)

Não há, nos dois livros, qualquer sugestão explícita da relação de tais representações com os orbitais. Entretanto, como vimos que esses livros compreendem o orbital como correspondendo à densidade eletrônica, podemos supor que essas representações se refiram a orbitais.

As imagens dos orbitais como nuvens eletrônicas (Figura 4), superfícies limites (Figura 5) ou como potencial eletrostático (7) evidenciam, nos livros, o emprego de distintas representações que remetem ao mesmo objeto, cada qual visando ressaltar um ou mais aspectos particulares do orbital: as nuvens eletrônicas enfocam no comportamento probabilístico do elétron, salientando as diferentes probabilidades de serem medidos em diferentes posições conforme a distância em relação ao núcleo; as superfícies limites destacam as formas e o caráter direcional dos orbitais; e o potencial eletrostático salienta a distribuição da probabilidade eletrônica em moléculas. Esta última representação se distingue da primeira por abarcar diversos elétrons, enquanto a primeira se refere a um elétron, ainda que isso nem sempre explicitado pelos livros. As duas representações diferem

ainda pelo grau de sofisticação das imagens de potencial eletrostático, descritas como sendo oriundas da modelagem de moléculas por meio de *softwares*.

O que se vislumbra por meio dessa diversidade de *representações icônicas do orbital*, segundo a perspectiva semiótica, se refere ao fato de que qualquer representação do orbital contempla apenas certos aspectos e, nessa medida, sempre está em falta com seu objeto, resultando necessariamente numa representação incompleta. Essa incompletude nos leva a gerar novas representações que buscam, principalmente, complementar o que as demais não abarcam. Isso pode ser observado nos livros, que apresentam diferentes representações icônicas para o orbital, conforme as qualidades que se deseja destacar. Todavia, no âmbito dos livros de Química Geral, os subsídios para que as habilidades de manejo e compreensão das diversas representações (SOUZA, 2012) se concretize são insuficientes, pois os limites e possibilidades de cada representação não são destacadas nos livros.

6.4.2. Uma ambiguidade: afinal, o que é o orbital?

Brady e Humiston (1986), Kotz e Treichel (1998) e Atkins e Jones (2001) definem preliminarmente o orbital como a função de onda Ψ , e, posteriormente, representam o orbital iconicamente através da densidade de probabilidade máxima. Assim, a seguinte dúvida pode se apresentar ao estudante: O orbital se refere ao que os livros descrevem na *base conceitual do orbital*, nesse caso a função de onda Ψ ? Ou o orbital se refere ao que os livros representam iconicamente, nesse caso a densidade de probabilidade máxima? Ou, ainda, ambas as compreensões são válidas, isto é, o orbital é tanto a função de onda Ψ quanto a densidade de probabilidade?

Uma ambiguidade semelhante a essa se constata, também, nos livros de Ohlweiler (1967), Slabaugh e Parsons (1977) e Masterton e Slowinski (1978), com a diferença de que esses definem preliminarmente o orbital como se referindo aos números quânticos e, posteriormente, representam iconicamente o orbital através da densidade de probabilidade máxima.

No livro de Ohlweiler (1967), por exemplo, além da representação diferir do que foi descrito na base conceitual do orbital, a descrição da imagem do orbital não só não menciona a definição em termos de números quânticos, como acrescenta a função de onda e o conceito de densidade de probabilidade, criando a ambiguidade para o estudante: ora a descrição sugere que as imagens sejam a função de onda Ψ , ora a densidade de probabilidade. A seguinte imagem exemplifica essa ambiguidade:

FIG. 25. Superfície e limites das orbitais P

Figura 8 – Imagens de orbitais em Ohlweiler (1967)

Na citação a seguir, notamos que Ohlweiler (1967) recorre tanto à função de onda quanto à densidade de probabilidade para caracterizar as imagens dos orbitais expostas na Figura 8:

No caso dos elétrons $2p$ ($n=2$, $l=1$), as funções de onda dependem de r , θ e φ . Em outras palavras, a densidade eletrônica depende não apenas da distância em relação ao núcleo, mas ainda da direção. A Fig. 25 [Figura 8] representa as superfícies limites dos orbitais $2p$ (95% de probabilidade do elétron situar-se no interior do volume indicado). Os orbitais $2p$ têm a forma de halteres distorcidos e são designados por $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$, conforme a orientação de seus lóbulos ao longo dos eixos x , y ou z respectivamente. (OHLWEILER, 1967, p. 68, 69, grifo nosso)

Nessa citação, observamos que a *representação icônica* parece se referir à função de onda, mas o texto refere-se à densidade eletrônica. Não há uma explicitação, nesta passagem, da relação entre a função de onda e a densidade eletrônica. Na forma em que está, o texto sugere uma equivalência entre uma e outra.

Outro ponto que chama a atenção na citação acima diz respeito à descrição feita pelos autores da forma dos orbitais que aparecem na Figura 8. O texto descreve sua forma como sendo de *halteres distorcidos*, embora a figura exiba formas esféricas.

Desse modo, assim como há um grupo de livros que definem, na *base conceitual*, o orbital como sendo a função de onda Ψ , mas, posteriormente, caracterizam as imagens dos orbitais como a densidade de probabilidade máxima, há, também, alguns livros que transmitem essa ambiguidade na própria caracterização da imagem rotulada como um orbital. Essa ambiguidade se deve a uma ausência de esclarecimento, não só deste grupo de livros, mas, em linhas gerais, de todos os livros de Química Geral, em relação às similaridades e diferenças entre a função de onda Ψ e a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , esta última entendida como a densidade de probabilidade. Este é um problema comumente presente em livros didáticos de Química Geral, como apontado por Niaz e Fernández (2008).

Após observarmos a predominância da caracterização das imagens dos orbitais como se referindo à densidade de probabilidade máxima, salientamos que apenas um livro descreve as imagens dos orbitais como se referindo às funções de onda.

Figura 9 – Imagens de orbitais em Partington (1950)

O livro de Partington (1950) apenas expõe imagens de orbitais, tais como a Figura 9, na discussão sobre a ligação química. No entanto, não atribui a essa representação a palavra *orbital*, pois, como dito anteriormente, Partington (1950) não faz uso desse termo. No corpo do texto, o autor sugere que essas representações sejam provenientes das funções de onda:

[...] outra regra afirma que se *forma uma ligação pela superposição máxima das funções de ondas*. Por consequência, os átomos de hidrogênio devem aproximar-se ao longo de duas direções dos eixos das funções de onda dos elétrons de valência p do oxigênio, que são ortogonais, mostrando-se na figura 161 [Figura 9] a molécula de H_2O formada. (PARTINGTON, 1950, p. 331, grifo nosso)

Por fim, apresentamos as imagens expostas como orbitais em Pauling (1967). Dentre todos os livros investigados, esse é o único que não caracteriza as imagens rotuladas como orbitais. Assim como Partington (1950), Pauling (1967) somente exhibe representações para orbitais no contexto da ligação química e, particularmente, na descrição de orbitais híbridos:

Figura 10 – Imagem de um orbital s (à esquerda) e quatro orbitais sp^3 (à direita) em Pauling (1967)

Pauling (1967) indica sucintamente que a Figura 10 “mostra os quatro orbitais tetraédricos de um átomo tetravalente” (PAULING, 1967, p. 247), particularmente o orbital híbrido sp^3 do carbono, sem qualquer descrição quanto a que se referem as imagens dos orbitais no âmbito da teoria, isto é, se representam funções de onda ou se representam densidades de probabilidade.

6.4.3. Diferentes formas dos lobos dos orbitais p

Durante a investigação, observamos que diferentes formas foram vinculadas aos orbitais p quando esses eram introduzidos pela primeira vez⁵² pelos livros didáticos de Química Geral. Tomando como exemplos as representações dos orbitais p já expostas neste trabalho, notamos formas ligeiramente diferentes para os lobos desse orbital: em Ohlweiler (1967) são circunferências que remetem a esferas no nível tridimensional (Figura 8); em Mahan (1970) são esferas achatadas (Figura 5 (a)); e em Brady e Humiston (1986), as representações se assemelham a halteres distorcidos (Figura 5 (d)). A Tabela 8 mostra a distribuição desses três tipos de representações entre os livros investigados:

Tabela 8 – Diferentes formas dos orbitais p apresentadas nos livros didáticos de Química Geral

⁵² Ressaltamos a condição de *primeira vez*, pois, no âmbito da discussão da hibridização dos orbitais, há formas que se assemelham às dos orbitais p , mas que se referem a orbitais provenientes da hibridização entre orbitais s e p . Essa descrição é indicada pelos livros.

Formas dos orbitais p	Livros	Número de livros ⁵³
Esferas achatadas	Hardwick (1965); Mahan (1970); Pimentel e Spratley (1974); O'Connor (1977); Russell (1981); Kotz e Treichel (1998); e Atkins e Jones (2001).	7
Halteres distorcidos (alongados)	Partington (1950); Masterton e Slowinski (1978); Quagliano e Vallarino (1979); Brady e Humiston (1986); Brown, LeMay e Bursten (1999).	5
Esferas	Ohlweiler (1967); Sienko e Plane (1968); Slabaugh e Parsons (1977).	3

Constata-se que, em um mesmo livro, as referidas representações não se alteram, pelo menos quando se referem estritamente aos orbitais *atômicos* p – no caso dos orbitais híbridos, discutidos na ligação química, as formas dos lobos são distintas conforme a hibridização. Assim, a princípio, nenhum problema epistemológico surge nesse caso. Todavia, esse panorama pode mudar se os estudantes recorrerem a diferentes livros de Química Geral e observarem essas diferenças nas formas dos orbitais p . Podemos então indagar qual a origem dessa multiplicidade de formas dos orbitais p .

Pessoa Jr. (2007) esclarece que as formas dos orbitais, para espécies monoelétrônicas, são dependentes das equações matemáticas utilizadas para produzi-los. Em linhas gerais, diferentes formas se originam se selecionamos a função de onda Ψ ou a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 . Se utilizarmos a função de onda Ψ para representar os orbitais p , obteremos lobos arredondados, como apresentado, por exemplo, na Figura 8. Por outro lado, a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , gera formas de halteres distorcidos (alongados) para os lobos dos orbitais p , tal como exibido na Figura 5 (d).

Diante disso, pode-se verificar se as formas dos orbitais p veiculadas pelos livros estão de acordo com a explicação de Pessoa Jr. (2007). Vamos considerar os livros nos quais as imagens dos orbitais são caracterizadas como se referindo à densidade de probabilidade máxima (Ψ^2), conforme a Tabela 7. De acordo com Pessoa Jr. (2007), esse grupo de livros deveria apresentar os lobos de orbitais p como halteres distorcidos. Entretanto, observamos que somente 3 livros, de um total de 12, apresentam os lobos dos orbitais p como halteres distorcidos. Nos demais, nota-se que diferentes formas dos lobos dos orbitais p são veiculadas pelos livros. Portanto, conclui-se que não há rigor por parte

⁵³ Apenas Pauling (1967) não foi compilado nesta tabela, visto que esse não apresenta orbitais p puros em seu livro.

dos autores dos livros de Química Geral na seleção das imagens referentes a esses orbitais. Além disso, esse resultado parece sugerir que os autores de livros didáticos desconhecem que, conforme a equação matemática empregada, diferentes formas para os orbitais podem ser obtidas.

Essa falta de rigor dos livros didáticos nos parece ser fruto de sua orientação epistemológica no que se refere à introdução do conceito de orbital, a qual subsidia a concepção das imagens: o apelo a um entendimento *qualitativo* (probabilidade de se encontrar o elétron ao redor do núcleo) e *icônico* (forma e natureza direcional dos orbitais), em detrimento do rigor matemático e, portanto, *simbólico*, que estaria por trás desse entendimento. Este ponto será discutido em maiores detalhes na categoria *representação simbólica do orbital*, particularmente no que diz respeito às equações matemáticas empregadas pelos livros de Química Geral.

6.4.4. Representações icônicas de *orbitais vazios*: entidades independentes dos elétrons

Um ponto notável em alguns livros de Química Geral diz respeito ao emprego de *representações icônicas* para *orbitais vazios* (Figura 11), ao tratar do tópico ligações químicas. A compreensão expressa nos livros de Química Geral a respeito dos orbitais vazios será discutida com maior detalhamento na categoria *representação simbólica do orbital*, particularmente no âmbito da discussão dos diagramas de energia de orbitais. Se os orbitais vazios estão amplamente presentes na forma de representações simbólicas, na categoria *representações icônicas* os orbitais aparecem em somente quatro dos livros analisados. Apesar dessas representações não terem muito espaço nos livros de Química Geral, no decorrer do curso universitário de Química esse termo ganhará mais espaço e importância na explicação da ligação química. Por exemplo, em disciplinas de química de coordenação e organometálicos, metais e ligantes são descritos como possuindo orbitais vazios disponíveis – isto é, com simetria e energia adequadas – para a formação de ligações.

Nesses livros, observamos a representação e a manipulação de orbitais vazios visando discutir a formação da ligação química entre orbitais *cheios* e *vazios*. Nas representações a seguir, é possível notar a interpenetração desses diferentes orbitais:

Figura 11 – Representações da sobreposição de orbitais vazios e orbitais preenchidos: (a) sobreposição de um orbital preenchido do N com um orbital vazio da Pt (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979); (b) sobreposição do orbital preenchido do C do CO com um orbital vazio d de um metal de transição (ATKINS & JONES, 2001); (c) sobreposição do orbital do O da água com um orbital vazio do Be (KOTZ & TREICHEL, 1998); (d) retrodoação do orbital d para os orbitais π vazios do CO (ATKINS & JONES, 2001); (e) sobreposição de um orbital vazio de um metal com um orbital preenchido do N da amônia (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999)

Na Figura 11, apenas Atkins e Jones (2001) exibem representações consideravelmente diferentes para orbitais *cheios*, que são preenchidos com uma dada cor, e orbitais *vazios*, que não são preenchidos. Ainda assim, da mesma forma que nas demais representações, sugere-se que há uma interação concreta (real) entre um orbital preenchido e um orbital vazio, ou, em outros termos, que há estatutos ontológicos iguais entre orbitais cheios e orbitais vazios.

Segundo Ogilvie (1990), o uso corriqueiro e irrefletido de termos como *orbitais vazios* para explicar a doação- π ou a retrodoação em orbitais d na pesquisa em Química e no Ensino de Química sugere que não só os orbitais, mas também os orbitais vazios, existem. No âmbito dos livros, isso ganha ainda mais força por meio da representação icônica, a qual, devido à sua natureza, sugere o estatuto ontológico daquilo que é representado, em termos de sua existência e de uma forma definida.

Outra consequência dessa representação é a sugestão, de maneira mais persuasiva, de que o orbital é independente do elétron (MULDER, 2010; 2011). Na discussão das representações dos orbitais por superfícies limites, observamos que as descrições das imagens ainda direcionavam suas considerações ontológicas para o elétron, embora as

representações propriamente ditas ofuscassem isso, pois transmitiam a compreensão de um objeto concreto, com superfícies contínuas e uniformes. Quando observamos o emprego dos orbitais vazios como, por exemplo, na Figura 11 **(d)**, o texto respectivo descreve que em “um ácido de Lewis, [...] o seu orbital antiligante π vazio pode aceitar densidade eletrônica de um metal” (ATKINS & JONES, 2001, p. 721). Neste trecho, não se identifica mais o recurso ao elétron para justificar a origem do orbital vazio representado, corroborando a suposta independência do orbital em relação ao elétron.

Como já mencionado, segundo a semiótica peirceana, os objetos dos quais as representações tomam o lugar não necessitam de existência concreta, e podem ser apenas imagináveis (hipotéticos). Diante disso, o problema que se põe aqui, independente de considerarmos se essas representações se referem ou não a algo na Natureza, está relacionado às compreensões geradas para o conceito de orbital, ou, nos termos da semiótica peirceana, aos interpretantes que as representações geram nos estudantes. Como não há, praticamente, discussões quanto ao estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais vazios nos livros de Química Geral, as interpretações de seu significado são delegadas aos estudantes. Eventualmente, essas interpretações podem contrastar com a compreensão pretendida, ainda que não explicitada, pelos livros.

6.4.5. Como são obtidas ou produzidas as imagens dos orbitais: questões em aberto

Podemos observar que, durante o século XX, há uma diversidade de legendas que acompanham as imagens referentes a orbitais. Em Hardwick (1965), as representações dos orbitais são descritas como uma *versão artística do aspecto de um orbital*; Pauling (1967) descreve as imagens como um *diagrama ilustrativo*; Sienko e Plane (1968) e Slabaugh e Parsons (1977) descrevem as imagens apenas como as *formas dos orbitais*; para Pimental e Spratley (1974), são *gráficos de densidade de probabilidade*; O'Connor (1977) caracteriza as imagens como um *diagrama de probabilidade*; Ohlweiler (1967), Mahan (1970), Quagliano e Vallarino (1979), Russell (1981), Kotz e Treichel (1998), Brown, LeMay e Bursten (1999) e Atkins e Jones (2001) descrevem as imagens como *superfícies limites* dos orbitais. Na maioria dessas caracterizações não se menciona a palavra orbital; contudo, no corpo do texto, essa palavra é evocada para rotular a imagem.

Os rótulos atribuídos pelos livros de Química Geral às imagens dos orbitais, bem como as próprias imagens em si, não nos explicitam como elas foram obtidas ou produzidas. Conforme apresentado na seção 4.3.2, as imagens podem ser produzidas artesanalmente (paradigma pré-fotográfico), obtidas por meio de captação fotográfica

(paradigma fotográfico), ou, produzidas por meio de *softwares* de simulação municiados por equações matemáticas (paradigma pós-fotográfico).

Somente os livros da última década do século XX comentam a respeito da origem e natureza das imagens utilizadas na obra. Entretanto, reservam esses sucintos esclarecimentos para as seções iniciais dos livros, especialmente nos prefácios ao leitor. Por exemplo, Atkins e Jones (2001) destacam que todas as imagens foram feitas por eles próprios, sem o auxílio de qualquer artista. Segundo eles, as imagens visam compartilhar visualmente os conceitos químicos, e são importantes pelo fato de que a “Química envolve um incessante ir e vir através da ponte que une o imaginado (nossos modelos) e o percebido (nossas observações)” (ibid., p. XXVI). Atkins e Jones (2001) descrevem como foram produzidas as imagens dos orbitais reproduzidas na Figura 7, que representam potenciais eletrostáticos. Segundo os autores, essas imagens foram produzidas por um *software*. Embora não sejam descritas como orbitais, as imagens sugerem ser orbitais, particularmente orbitais moleculares. As imagens dos orbitais que são apresentadas no capítulo que introduz esse conceito (como a Figura 5), não têm sua origem explicada pelos autores. Quando comparamos a sofisticação das imagens de orbitais das Figuras 5 e 7, podemos supor que as imagens de orbitais foram desenhadas pelos autores. Nos demais livros dessa década, apenas se descreve genericamente que as imagens presentes na obra foram desenhadas ou produzidas por meio de *softwares*, sem indicar qual dessas duas técnicas foi utilizada na produção das imagens dos orbitais.

Nenhum dos livros afirma explicitamente que as imagens apresentadas como orbitais são fotografias, tal como se alegou, em certas instâncias, a respeito das imagens divulgadas por Zuo e colaboradores (1999) na revista *Nature*. De modo geral, as técnicas de obtenção ou produção das imagens não são esclarecidas pelos livros de Química Geral.

A importância de se fazer esse esclarecimento se baseia no fato de que, conforme a natureza da imagem, diferentes relações entre ela e o mundo são transmitidas: desenhos se amparam majoritariamente em relações simbólicas; imagens produzidas por computador, em relações icônicas; e fotografias, em relações indiciais (SANTAELLA & NÖTH, 2008). Cada uma delas acarreta diferentes pesos para a atribuição do estatuto ontológico ao que é representado. As imagens de manifestação majoritariamente simbólica possuem menor caráter de referencialidade, dado que, a partir do símbolo em si não se identificam as coisas às quais ele se refere. Nas imagens de caráter icônico há um aumento da capacidade referencial, dado que ela pode ter alguma semelhança com o objeto representado, de modo a sugerir tanto a existência dele quanto das qualidades representadas. Por fim, nas imagens de caráter indicial, não existe a ambiguidade presente no ícone, de maneira que a

referencialidade é direta e indica o objeto, não havendo dúvidas, assim, quanto à existência do objeto e informando que o objeto é na Natureza tal como a imagem sugere.

Embora não esteja explícita nos livros a origem das imagens dos orbitais, de maneira geral, elas se caracterizam por sua natureza majoritariamente icônica. Essas transmitem ao leitor qualidades do conceito, como, por exemplo, a forma e a natureza direcional dos orbitais. Além disso, não há grande sofisticação das imagens a ponto de se sugerir que são fotografias dos orbitais. Ainda que predomine o caráter icônico, o poder referencial delas se mantém, sugerindo ao leitor que os orbitais existem, bem como as qualidades ressaltadas. Essa sugestão pode ser tomada pelo estudante como um índice, como se as imagens resultassem de alguma forma de processo “fotográfico”. Se esse não é o desejo dos autores dos livros didáticos, observa-se aqui um possível obstáculo ao aprendizado do conceito, ainda mais na ausência de esclarecimentos, por partes dos livros, quanto aos significados ontológico e epistemológico das representações dos orbitais.

6.5. Representação simbólica do orbital

A terceira e última categoria delimitada nesta investigação é a *representação simbólica do orbital*, que reúne as representações dos orbitais por meio de equações matemáticas e diagramas. As equações foram observadas em poucos livros e, mesmo quando presentes, possuem caráter meramente ilustrativo, isto é, os livros não fazem operações com as equações, nem as utilizam explicitamente para subsidiar explicações que envolvam o conceito de orbital. Por outro lado, os diagramas são amplamente utilizados pelos livros de Química Geral do século XX, com diferentes finalidades conforme o contexto: diagrama de orbitais são utilizados para se determinar a configuração eletrônica completa de átomos ou íons; e diagramas de energia de orbitais são utilizados para apresentar os diferentes níveis de energia dos orbitais.

6.5.1. Equações matemáticas e seu caráter meramente ilustrativo

Todos os livros de Química Geral analisados adotam uma abordagem essencialmente qualitativa em relação à Mecânica Ondulatória – a qual se caracteriza por empregar conceitos e técnicas matemáticas sofisticadas para a descrição dos fenômenos quânticos.

Os livros didáticos de Química Geral têm como objetivo introduzir conceitos fundamentais de Química para os estudantes universitários, sem exigir requisitos prévios de

Cálculo Diferencial e Integral, o que implica em não aprofundamento da matemática subjacente à Mecânica Quântica.

O que distingue um livro do outro nesse quesito é o ilustrar ou não das equações matemáticas centrais da Mecânica Ondulatória, ainda que sem detalhes matemáticos a respeito de como essas equações são obtidas. O caráter ilustrativo se manifesta no fato de que os livros não fazem operações matemáticas com as equações, nem as utilizam para embasar explicitamente as explicações que envolvem o conceito de orbital. Por exemplo, nenhum dos livros da Tabela 6 que afirmam que a função de onda é produzida a partir da equação de Schrödinger exibe os passos matemáticos para se fazer isso, ou seja, a integração de uma equação diferencial de segunda ordem considerando certas condições de contorno. Essa abordagem privilegia, portanto, os resultados da Mecânica Ondulatória, sem entrar em detalhes de como são obtidos. Para ilustrar isso, apresentamos algumas citações extraídas de livros das duas últimas décadas do século XX:

[...] teremos necessidade de nos referir a alguma matemática superior, porém não “praticaremos” nenhuma. (RUSSELL, 1981, p. 160)

[...] a matemática utilizada é bastante avançada, de forma que a evitaremos e olharemos apenas para os resultados da teoria. (BRADY & HUMISTON, p. 90)

[...] não precisamos nos preocupar com matemática, mas as soluções da equação - denominadas **funções de onda** – são importante para a Química. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 214)

[...] a aplicação da equação de Schrodinger utiliza teorias matemáticas avançadas, e não trataremos dos seus detalhes. (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999, p. 125)

A citação de Russell (1981) expressa o que chamamos de caráter ilustrativo das equações, reconhecendo que há conceitos matemáticos por trás daquilo que é introduzido qualitativamente, mas que não serão desenvolvidos pelo livro.

Na Tabela 6, exibida na seção *base conceitual do orbital*, apresentamos os constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória que são mencionados pelos livros de Química Geral. Entretanto, o número de livros que, de fato, exibem esses constructos é bem reduzido, abarcando 7 livros dos 16 investigados: Pimentel e Spratley (1974), O'Connor (1977) e Masterton e Slowinski (1978) apresentam somente a equação de onda; enquanto Ohlweiler (1967), Mahan (1970), Russell (1981) e Atkins e Jones (2001) apresentam tanto a equação de onda quanto a função de onda Ψ . Estes últimos apresentam também o conceito de densidade de probabilidade ou Ψ^2 , entendido como decorrente da função de onda Ψ . Como nenhum dos livros define o orbital como equação de onda, tal como exposto na Tabela 6, inferimos que somente o último grupo de livros citado, totalizando 4 livros, pode

eventualmente sugerir a relação do orbital com uma equação matemática. Dessa maneira, restringiremos nossa atenção a esse grupo de livros.

Russell (1981) apresenta somente a função de onda simplificada para o estado fundamental do átomo de hidrogênio. Ohlweiler (1967), Mahan (1970), e Atkins e Jones (2001), por sua vez, expõem as funções de onda Ψ para os estados iniciais, de menor energia, do hidrogênio:

TABELA 1.2 Funções de onda do hidrogênio (orbitais atômicos)

$$\begin{aligned}
 1s \quad \Psi &= \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0} \\
 2s \quad \Psi &= -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0} \\
 2p \quad \Psi &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a_0^3} \right)^{1/2} r e^{-r/2a_0} \begin{cases} \cos \theta & (2p_z) \\ \sin \theta \cos \phi & (2p_x) \\ \sin \theta \sin \phi & (2p_y) \end{cases} \\
 3s \quad \Psi &= \frac{1}{9} \left(\frac{1}{3\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(3 - \frac{2r}{a_0} + \frac{2r^2}{9a_0^2} \right) e^{-r/3a_0} \\
 3p \quad \Psi &= -\frac{2}{27} \left(\frac{1}{2\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{3a_0} \right) r e^{-r/3a_0} \begin{cases} \cos \theta & (3p_z) \\ \sin \theta \cos \phi & (3p_x) \\ \sin \theta \sin \phi & (3p_y) \end{cases} \\
 3d \quad \Psi &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{6\pi a_0^3} \right)^{1/2} r^2 e^{-r/3a_0} \begin{cases} (3 \cos^2 \theta - 1) & (3d_{z^2}) \\ 2\sqrt{3} \sin \theta \cos \theta \cos \phi & (3d_{zx}) \\ 2\sqrt{3} \sin \theta \cos \theta \sin \phi & (3d_{zy}) \\ \sqrt{3} \sin^2 \theta \cos 2\phi & (3d_{x^2-y^2}) \\ \sqrt{3} \sin^2 \theta \sin 2\phi & (3d_{xy}) \end{cases}
 \end{aligned}$$

Nota: Em todos os casos, $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$, ou próximo de 52,9 pm.

Figura 12 – Funções de onda Ψ no livro de Atkins e Jones (2001)

Observando a Tabela 6, notamos que diferentes definições são dadas para o conceito de orbital nesse grupo de livros: Ohlweiler (1967) relaciona os orbitais com os números quânticos; Mahan (1970) e Russell (1981) definem o orbital como correspondendo à densidade de probabilidade (Ψ^2), relacionada com a função de onda Ψ ; e Atkins e Jones (2001) definem o orbital como correspondendo à função de onda Ψ . Excetuando-se Ohlweiler (1967), o qual não possibilita uma relação direta com qualquer equação matemática, os demais livros sugerem uma compreensão simbólica para o conceito de orbital, proveniente de sua associação com uma equação matemática.

Se o recurso a equações matemáticas nos livros de Química Geral ocorre raramente, ainda que apenas com o intuito de mostrá-las, por outro lado, a utilização de gráficos para exibir o comportamento de tais equações se faz presente em boa parte dos livros analisados. Os gráficos visam, em sua maioria, apresentar o comportamento do elétron de acordo com sua distância para o núcleo, utilizando o conceito de densidade de probabilidade Ψ^2 , em detrimento da função de onda Ψ . Apenas três livros, Ohweiler (1967), Pimentel e Spratley (1974) e Atkins e Jones (2001) (Figura 3), expõem o comportamento tanto da função de onda Ψ quanto de Ψ^2 por meio de gráficos.

A seguir, apresentamos alguns gráficos comumente expostos pelos livros de Química Geral, especialmente os que caracterizam o comportamento de Ψ^2 , no eixo y, em função da distância do elétron para o núcleo, no eixo x. Não entraremos em detalhes sobre esses gráficos: nosso objetivo é apenas ilustrar que os livros de Química Geral recorrem a tal recurso, em vez de se apoiarem em considerações matemáticas aprofundadas.

Figura 13 – Gráficos de Ψ^2 para subsidiar o entendimento de como o elétron se comporta conforme a distância para o núcleo: **(a)** comportamento de $\Psi^2 \cdot 4\pi r^2$ para o orbital 1s ($n=1$), 2s ($n=2$) e 3s ($n=3$) (OHLWEILER, 1967); **(b)** comportamento de Ψ^2 para orbital 1s (PIMENTEL & SPRATLEY, 1974); **(c)** comportamento de Ψ^2 para o orbital 1s (RUSSELL, 1981); **(d)** comportamento de Ψ^2 para o orbital 1s indicando o r em que a probabilidade de encontrar o elétron é de 90% (KOTZ & TREICHEL, 1998)

Além das equações matemáticas relacionadas à função de onda, identificam-se, em alguns livros de Química Geral, as equações das energias dos orbitais. Essas equações se referem, unicamente, às energias dos orbitais de espécies monoelétrônicas, tal como proposto pela teoria de Bohr para prever a energia das órbitas eletrônicas:

$$E_n = -\frac{2\pi^2 Z^2 e^4 m}{h^2 n^2} \quad (3)$$

onde Z é o número atômico da espécie em questão, e é a carga do elétron, m é a massa do elétron, h é a constante de Planck e n é o número quântico principal. Embora a correspondência entre o cálculo das energias pela teoria de Bohr e pela teoria de Schrödinger seja destacada apenas em um número reduzido de livros, antes da discussão da Mecânica Ondulatória, nota-se a presença da teoria de Bohr e suas principais equações em quase todos os livros investigados.

Além disso, ressaltamos que nenhuma equação das energias de orbitais polieletrônicos é apresentada aos estudantes. Essa distinção entre espécies monoeletrônicas e polieletrônicas refletirá, posteriormente, em diagramas de energia de orbitais de diferentes naturezas, que serão abordados mais adiante nesta dissertação.

A característica dos livros de Química Geral em não se ater aprofundadamente à Matemática já havia sido preconizada nas introduções das obras por seus autores. Nelas, se observa que poucos livros exigem pré-requisitos de Cálculo Diferencial e Integral dos estudantes, que seriam de suma importância para compreender os constructos matemáticos da Mecânica Ondulatória. Além disso, os livros são recomendados para estudantes das ciências naturais (Química, Física, Biologia) e engenharias, cada qual atribuindo uma diferente importância para a Química e, especialmente, para a Mecânica Quântica, na formação do estudante. Como os livros de Química Geral são o primeiro contato que os estudantes têm com a Química do Ensino Superior, abarcando diversos tópicos que poderão ser aprofundados em momentos posteriores, os autores optam por apresentar a Mecânica Quântica apenas qualitativamente.

Como descrito nos debates no *Journal of Chemical Education*, alguns químicos e educadores químicos como Ogilvie (1990) e Pauling (1992) consideram que é justamente essa abordagem qualitativa adotada pelos livros de Química Geral que conduz os estudantes a formarem concepções alternativas sobre o conceito de orbital. Segundo eles, não é possível ensinar *apenas* em termos qualitativos uma teoria que se sustenta em uma matemática avançada.

Por outro lado, podemos atribuir a adoção de uma abordagem qualitativa por parte dos livros à própria formação anterior dos estudantes, que não contemplou esses conhecimentos matemáticos. Também parece razoável que essa abordagem seja decorrente do modo como os químicos, de maneira geral, lidam com a Mecânica Quântica, em termos qualitativos e semi-clássicos (LABARCA & LOMBARDI, 2010).

Essa peculiar apropriação da Mecânica Quântica pelos químicos pode ser entendida sob o referencial da Semiótica Química. Por exemplo, o amplo emprego das imagens de

orbitais em livros didáticos de Química Geral contrasta com o panorama oriundo das pesquisas em Química Quântica. Segundo Schwarz (2006), a maioria dos pesquisadores de Química Quântica não faz uso de imagens de orbitais em suas investigações rotineiras. Em vez disso, constroem os orbitais através da solução da equação de Schrödinger em computadores, e usam tais resultados para calcular propriedades atômicas ou moleculares. Ostrovsky (2005) acrescenta que esses pesquisadores buscam grande precisão numérica em suas investigações, em detrimento de compreensões qualitativas oriundas do uso de imagens. Ou seja, enquanto para os químicos o apelo ao conceito de orbital se dá preferencialmente pelo emprego de *representações icônicas* (imagens que buscam representar determinadas qualidades), os físicos preferem as *representações simbólicas* dos orbitais (equações). Como aponta Souza (2012), os livros de Química Geral no decorrer do século XX foram atribuindo maior importância a aspectos icônicos da representação, em detrimento de aspectos simbólicos, o que pode ser indício de uma particularidade da Química. Essa hipótese se torna ainda mais promissora quando temos em mente a investigação de Lemes (2013) com doutorandos de diferentes áreas da Química (Inorgânica, Orgânica, Analítica, Físico-Química e Bioquímica). Lemes observou que os doutorandos da área de Físico-Química, particularmente os da Química Teórica, põem em dúvida se aquilo que fazem em suas pesquisas rotineiras é tipicamente Química, dentre outros motivos, pelo apelo majoritário ao *simbólico* em suas atividades. Além disso, comparando o conteúdo dos livros de Química Geral e os resultados da pesquisa de Lemes (2013), concluímos que, mesmo após terem cursado disciplinas avançadas de química quântica em suas graduações, caracterizadas pelo aprofundamento matemático, os doutorandos entrevistados ainda retêm, em sua maioria, compreensões análogas às presentes nos livros didáticos de Química Geral – isto é, compreensões realistas (orbitais existem e possuem as formas exibidas pelos livros), qualitativas (orbitais são regiões onde é mais provável se encontrar o elétron) e icônicas (as compreensões dos orbitais são fundamentadas em representações que privilegiam qualidades do objeto representado).

Podemos encarar essa questão, ainda, sob outra perspectiva, que não exclui a anterior. Tendo em vista as considerações de Jenkins (2003), os livros de Química Geral e os pesquisadores em Química Teórica têm objetivos distintos, o que justificaria o apelo a diferentes abordagens. Os livros visam ensinar Química a estudantes ingressantes no Ensino Superior, de modo que o recurso a explicações mais simples, de natureza majoritariamente qualitativa, como as *representações icônicas dos orbitais*, seria adequado para esse contexto. Esse tipo de representação transmite com mais rapidez, no âmbito da ligação química, informações sobre os grupos funcionais das moléculas e sua geometria aproximada. Por outro lado, as pesquisas em Química Teórica requerem alta precisão

numérica, bem como que se considerem efeitos como o de correlação, que dificultam ou impossibilitam a identificação das informações que são obtidas pela abordagem qualitativa. Assim, cada abordagem fornece um tipo de explicação: uma, mais detalhada e compromissada com a precisão numérica, de interesse para os químicos teóricos; e outra, menos detalhada, mas frequentemente mais útil, em termos de categorias químicas mais familiares, que é o que se busca nos livros de Química Geral (JENKINS, 2003).

6.5.2. Diagramas: multiplicidade de aplicações

Os *diagramas de orbitais* e os *diagramas de energia de orbitais*, utilizados amplamente pelos livros de Química Geral, se referem à representação dos orbitais por caixas ($\square$) ou traços horizontais ($_$)⁵⁴, contendo ou não setas ($\uparrow\downarrow$), e acompanhados por letras (*s*, *p*, *d* e *f*) e números inteiros ($n \geq 1$), como, por exemplo, $1s _$. Os dois tipos de diagramas diferem quanto à associação de um eixo vertical indicando as energias relativas dos orbitais: os *diagramas de orbitais* não fazem uso de um eixo vertical de energia, de modo que as representações são dispostas em paralelo, sem evidenciar que se referem a diferentes níveis de energia; por outro lado, os *diagramas de energia de orbitais* fazem distinção entre os níveis de energia por meio de sua disposição conforme um eixo vertical⁵⁵ de energia, o qual aponta o sentido em que a energia aumenta.

Os diagramas de energia de orbitais foram observados em quase todos os livros investigados, exceto nos livros de Partington (1950) e Quagliano e Vallarino (1979), e os diagramas de orbitais estão presentes na maioria dos livros. Além disso, do mesmo modo que as imagens dos orbitais, os diagramas são, majoritariamente, introduzidos no capítulo sobre a estrutura da matéria.

A importância de tais diagramas é justificada pelos livros de Química Geral, ainda que não explicitamente, pelo fato de evidenciarem o arranjo dos elétrons nos átomos e íons, principalmente os elétrons de maior energia, denominados de *elétrons de valência*. Esses elétrons são de suma importância na formação da ligação química, discutida posteriormente pelos livros. A citação abaixo exemplifica a importância atribuída pelos livros de Química Geral aos diagramas:

⁵⁴ Além dessas representações, podemos constatar, nos livros de Química Geral do século XX, outras formas de representação simbólica para os orbitais: parênteses; circunferências contínuas e tracejadas.

⁵⁵ Destacamos que alguns livros não fazem uso do eixo vertical para indicar as energias relativas dos orbitais, simplesmente dispondo as representações dos orbitais verticalmente, como, por exemplo, o exibido na figura 17 (a).

Esta notação é particularmente útil, na consideração das redistribuições eletrônicas que ocorrem nas transformações químicas. (SLABAUGH & PARSONS, 1977, p. 41)

Tendo introduzido os diagramas de orbitais e os diagramas de energia de orbitais, os livros de Química Geral fazem uso deles para discutir a hibridização de orbitais (Figura 14) e as transições eletrônicas entre diferentes níveis de energia (Figura 15)⁵⁶. A primeira utilização é amplamente verificada nos livros investigados, enquanto que a segunda ocorre explicitamente em uma quantidade reduzida de livros.

Figura 14 – Diagramas de orbitais subsidiando a explicação da hibridização de orbitais: (a) hibridização de orbitais sp , sp^2 e sp^3 (SLABAUGH & PARSONS, 1977); (b) hibridização sp dos orbitais do berílio (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979); (c) hibridização sp^2 (RUSSELL, 1981); (d) hibridização sp^3 do carbono no metano (KOTZ & TREICHEL, 1998); (e) hibridização sp^2 (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999)

Em cursos avançados de Química Quântica, a hibridização de orbitais se refere à manipulação das funções de onda Ψ , ou seja, de equações matemáticas, com intuito de se obter combinações lineares dessas equações, isto é, novas funções de onda Ψ para descrever o elétron e a ligação química. Por outro lado, em sua abordagem qualitativa, os livros de Química Geral recorrem à manipulação das representações dos orbitais na forma de diagramas, no âmbito da hibridização. Em ambos os contextos, a manipulação de representações simbólicas é privilegiada. No entanto, no caso dos livros, a simplicidade

⁵⁶ Estamos considerando os livros que discutem explicitamente as transições eletrônicas por meio de diagramas simbólicos. Os diagramas de energia de orbitais apresentados pela primeira vez nos livros de Química Geral, geralmente, não têm como objetivo principal discutir aspectos das transições eletrônicas, o que somente é feito pelos livros posteriormente.

dessas representações, que convencionam apenas que *traços* ou *caixas* são orbitais e *setas* são elétrons, dispostos conforme as suas energias, explica o apelo a esses diagramas em detrimento das equações matemáticas, cuja utilização seria mais complexa. Além disso, as equações matemáticas primam pelo rigor quantitativo – isto é, seu uso visa obter dados passíveis de serem comparados com as investigações experimentais; enquanto o uso de diagramas objetiva explicitar relações de cunho qualitativo, como as diferenças de energia entre orbitais puros e orbitais híbridos (JENKINS, 2003). Assim, é possível inferir que os diagramas possuem um conjunto de regras para o seu uso que é mais simples que o das equações matemáticas relacionadas ao orbital, o que explica o uso generalizado dos diagramas nos livros de Química Geral.

Figura 15 – Diagramas de energia de orbitais subsidiando a explicação das transições eletrônicas entre diferentes orbitais: **(a)** transição eletrônica entre orbitais d do complexo $[\text{Ti(H}_2\text{O)}_6]^{3+}$ (MAHAN, 1970); **(b)** transição eletrônica entre orbitais d do complexo $[\text{Ti(H}_2\text{O)}_6]^{3+}$ (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979); **(c)** transição eletrônica entre orbitais d do complexo $[\text{Ti(H}_2\text{O)}_6]^{3+}$ (KOTZ & TREICHEL, 1998); **(d)** transição eletrônica entre orbitais d de um complexo (ATKINS & JONES, 2001)

O uso de diagramas de energia dos orbitais para discutir a transição eletrônica é raro nos livros de Química Geral do século XX. Apesar disso, em cursos de graduação em Química e na prática dos químicos, esses diagramas são amplamente empregados no contexto das espectroscopias eletrônicas (ultravioleta e visível).

Ostrovsky (2005) afirma que as transições eletrônicas entre diferentes orbitais, tal como indicado pelas representações da Figura 15, são exemplos da observação indireta dos orbitais: a observação se dá por intervenção sobre a Natureza – isto é, determina-se o fóton absorvido ou emitido por uma dada substância por meio de instrumentos científicos; e é indireta devido à carga interpretativa – os dados obtidos por meio dos instrumentos científicos são refinados e amparados à luz de uma teoria. Entretanto, segundo Ostrovsky

(2005), o que os químicos têm observado experimentalmente não é uma *entidade* denominada orbital, mas uma *propriedade* do átomo, particularmente a capacidade dos elétrons de absorver e emitir radiação quantizada (OSTROVSKY, 2005; OGILVIE, 2011; MULDER, 2011). Quando direcionamos esse entendimento para as representações das transições eletrônicas, notamos que é o elétron, ou no caso, sua representação por uma seta, que se modifica conforme a absorção ou emissão da luz. Diante disso, em um primeiro momento, essas representações sugerem que o que se observa, de fato, é a modificação do *comportamento* do elétron, enquanto o orbital, representado por uma caixa ou traço se mantém inalterado durante esse processo. Mais diante veremos, porém, que o modo como são definidas as representações simbólicas do elétron como uma seta, e do orbital como uma caixa, conduzem ao entendimento de que se trata de duas entidades independentes.

Podemos acrescentar, ainda, que as representações simbólicas das transições eletrônicas possuem um caráter indicial mais pronunciado dentre todas as representações observadas nos livros didáticos. As representações das transições eletrônicas se caracterizam por exibir uma relação existencial com o objeto: a absorção ou a emissão de luz pela matéria, mediada por instrumentos, conduz à busca pelo objeto que sofreu essa absorção ou emissão. Neste caso, a representação sugere que o objeto que sofreu tal fenômeno é o elétron. Assim, diferentemente da *representação icônica do orbital*, em que a relação com o elétron é sugerida, a representação da transição eletrônica indica o objeto de interesse.

A questão da observabilidade dos orbitais não está presente ou é muito sutil nos livros didáticos. Temos visto até aqui que as representações sugerem determinado estatuto ontológico para os orbitais, mas sem conduzir à concepção de que observações empíricas poderiam levar à obtenção de outras representações. Por exemplo, Kotz e Treichel (1998) descrevem hipoteticamente a obtenção de fotografias de orbitais, denotando, assim, a impossibilidade empírica de obtê-las. Esse ponto é reforçado pelos debates no *Journal of Chemical Education* de meados de 1990, descritos no **Capítulo 2**, em que somente se colocou em discussão a questão da existência dos orbitais, sem sequer se cogitar sua observação.

Além dos referidos usos dos diagramas, os livros de Química Geral recorrem a eles para apresentar procedimentos para o preenchimento de orbitais com elétrons, que serão discutidos mais adiante. Esses procedimentos fundamentam a construção de diagramas de energia de orbitais moleculares, provenientes da Teoria de Orbitais Moleculares (TOM), apresentada nos capítulos sobre as teorias quânticas para a ligação química. Os diagramas de energia de orbitais moleculares estão presentes em metade dos livros investigados, como exemplificado pela figura abaixo:

Figura 16 – Diagramas de energia de orbitais moleculares: **(a)** orbitais moleculares da molécula H₂ (SLABAUGH & PARSONS, 1977); **(b)** orbitais moleculares da molécula de Li₂ (RUSSELL, 1981); **(c)** orbitais moleculares do íon molecular He₂⁺ (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999); **(d)** orbitais moleculares da molécula de N₂ (ATKINS & JONES, 2001)

No próximo item, veremos como esses diagramas são introduzidos, pela primeira vez, nos livros analisados.

6.5.2.1. Diagramas de orbitais

Em geral, os livros didáticos reservam diferentes finalidades para os *diagramas de orbitais* e para os *diagramas de energia de orbitais*. O diagrama de orbitais é empregado na discussão do princípio de Aufbau (ou princípio da construção), cuja finalidade é popular com elétrons os orbitais dos átomos, seguindo a regra de Hund e o princípio de exclusão de Pauli, de modo a se obter a configuração eletrônica completa do átomo.

O preenchimento dos diagramas de orbitais se dá, de maneira geral, após a discussão dos números quânticos n (número quântico principal), l (número quântico do momento angular), m_l (número quântico magnético) e m_s (número quântico de spin). Esses quatro números quânticos fornecem a configuração eletrônica completa do átomo ou íon. Em geral, os livros analisados introduzem, primeiramente, o que podemos denominar de configuração eletrônica parcial do átomo ou íon, fundamentada somente nos dois primeiros números quânticos. Essa configuração eletrônica é expressa por três elementos: um número natural, que varia 1 a ∞ , referente ao número quântico principal n que designa o nível de

energia (quanto maior o valor de n , maior a energia); seguido por uma letra, comumente s , p , d ou f , que designa um subnível de energia do nível principal n e que se refere ao número quântico de momento angular ℓ ; e, por fim, um número sobrescrito a essa letra, referente também a ℓ , o qual expressa o número de elétrons presentes no subnível. Por exemplo, o átomo de C, com seis elétrons, possui a seguinte configuração eletrônica parcial: $1s^2 2s^2 2p^2$. Essa configuração não explicita a disposição dos elétrons conforme o número quântico magnético m_ℓ , omitindo-se que, no referido caso, os m_ℓ dos elétrons de valência do C podem assumir os valores -1 , 0 ou $+1$. Cada um destes números é descrito pelos livros de Química Geral como se referindo a um orbital do subnível p , ou seja, há três orbitais que podem ser preenchidos nesse subnível. Além disso, a configuração eletrônica parcial não evidencia se os elétrons estão emparelhados ou desemparelhados, o que é caracterizado pelo número quântico de spin m_s . Para evidenciar isso, os autores recorrem aos diagramas de orbitais, os quais ilustram a variação do número quântico magnético por meio das representações dos orbitais como caixas ou traços horizontais, cada qual representando um dado número quântico magnético, e pela disposição dos elétrons, que são comumente representados por setas ($\uparrow\downarrow$). Essa representação leva em conta o quarto número quântico, pois o sentido da seta (para cima ou para baixo) identifica o número quântico de spin.

A importância dos diagramas de orbitais reside, portanto, em evidenciar os números quânticos m_ℓ e m_s , negligenciados na configuração eletrônica parcial. A maioria dos livros didáticos não exprime isso explicitamente; uma exceção é exemplificada a seguir:

Ordinariamente as configurações eletrônicas tais como as estudadas até aqui são suficientemente adequadas para descrever o arranjo dos elétrons nos átomos. Em alguns casos, no entanto, descrições mais detalhadas são necessárias para fornecer maiores informações do que estas configurações eletrônicas. Há várias maneiras de fazê-lo; a mais detalhada seria uma relação completa dos quatro números quânticos para cada elétron no átomo. Mais comumente, usamos o chamado *diagrama orbital*, que indica o número de elétrons em cada orbital e seus relativos spins. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 112)

No caso dessas representações em particular, sua característica semiótica reside em um aumento dos aspectos contemplados pelos diagramas de orbitais em comparação com a configuração eletrônica parcial. Ainda assim, cada qual possui contextos próprios de aplicação e possibilidades, limites e objetivos distintos. Isso evidencia que não existem melhores ou piores representações, mas que a adequação de cada uma depende do objetivo pretendido, e que as representações podem ser mutuamente complementares.

Os livros de Química Geral orientam os estudantes no sentido de que o preenchimento dos diagramas de orbitais com elétrons deve ser pautado pela regra de Hund e pelo princípio de exclusão de Pauli. A regra de Hund indica que os diagramas de orbitais de mesma energia devem ser, primeiramente, semi-preenchidos e, somente então,

totalmente preenchidos. Os livros descrevem que, conforme o princípio de exclusão de Pauli, não mais do que dois elétrons podem ocupar um mesmo orbital. Essas orientações são exemplificadas pelas citações a seguir:

A configuração eletrônica de um átomo é uma maneira de dar as populações de cada um destes subníveis eletrônicos. Para chegar às configurações eletrônicas dos átomos, devemos conhecer a ordem na qual os vários subníveis começam a ser preenchidos. Em geral, os elétrons entram nos orbitais possíveis por ordem de suas energias crescentes, enchendo todas as posições dos orbitais inferiores antes de ocupar qualquer posição de energia superior. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 108)

A maneira específica pela qual os orbitais de um átomo são ocupados por elétrons é chamada de *configuração eletrônica* do átomo. Podemos prever a configuração eletrônica de muitos átomos utilizando o diagrama da Fig. 6-3. Este geralmente é chamado de *diagrama de preenchimento*, porque preenchendo-o a partir da base com elétrons podemos estabelecer a configuração eletrônica de cada átomo. (A Fig. 6-3 é melhor classificada como diagrama de preenchimento do que diagrama de níveis energéticos, porque a sequência real das energias dos orbitais não é exatamente a mesma para todos os átomos.). Para determinar as configurações do estado fundamental seguimos um método conhecido como procedimento de *Aufbau* (em alemão significa “construção”): os elétrons são adicionados ao diagrama de preenchimento começando pela base e avançando para cima. Isto garante que em cada átomo, todos os elétrons estão situados nos níveis de energia disponíveis mais baixos. (RUSSELL, 1981, p. 148)

Ainda que tais citações sugiram que o processo seja representado por um diagrama de energia de orbitais, a maioria dos livros o representa, de fato, por um diagrama de orbitais, sem enfatizar que diferentes níveis de energia são possíveis, conforme o orbital em questão.

(a)

Átomo	Diagrama orbital	Configuração eletrônica
B	$(\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow) () ()$	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	$(\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow) (\uparrow) ()$	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	$(\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow) (\uparrow) (\uparrow)$	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	$(\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow) (\uparrow)$	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	$(\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow)$	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	$(\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow) (\uparrow\downarrow)$	$1s^2 2s^2 2p^6$
	1s 2s 2p	

(b)

Elemento	Número atômico, Z	Configuração eletrônica	Diagrama de orbital		
			1s	2s	2p
Li	3	$1s^2 2s^1$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	
Be	4	$1s^2 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow$
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$

(c)

Elemento	Total de Elétrons	Diagrama de Orbitais				Configuração Eletrônica
		1s	2s	2p	3s	
Li	3	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$			$1s^2 2s^1$
Be	4	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$			$1s^2 2s^2$
B	5	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$		$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow$		$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$		$1s^2 2s^2 2p^3$
Ne	10	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$		$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	11	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Figura 17 – Diagramas de orbitais: **(a)** para a configuração eletrônica do B ao Ne (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978); **(b)** para configuração eletrônica do Li ao Ne (RUSSELL, 1981); **(c)** para configuração eletrônica do Li ao Na (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999)

6.5.2.1.1. A manifestação simbólica dos diagramas de orbitais

O significado das representações dos orbitais por colchetes, linhas horizontais ou caixas, e das representações dos elétrons por setas, tal como exposto na Figura 17, não é discutido nos livros de Química Geral do século XX. A maioria dos livros apresenta simples descrições, como nas citações a seguir:

Como geralmente interessa apenas o número de orbitais de uma subcamada, é conveniente representá-los por traço e indicar sua população por flechas com direções contrárias, para mostrar os dois possíveis spins (Secção 3.11). [...] Cada par de flechas representa um par eletrônico que ocupa aquele orbital particular; uma flecha isolada representa um elétron não-emparelhado em um orbital. (SIENKO & PLANE, 1968, p.416)

Isto pode ser escrito como diagrama orbital, usando parêntesis para indicar um orbital. As duas setas nos parêntesis indicam os dois elétrons nos orbitais saturados; o fato de que tenham sentidos opostos significa que os elétrons têm spins opostos e estão emparelhados. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 112)

Um método frequentemente empregado consiste em simbolizar um elétron com o seu spin em determinada direção por uma flecha apontada para

cima, $\uparrow$, e um elétron com spin oposto, por meio de uma flecha apontando para baixo, $\downarrow$. Para indicar a distribuição dos elétrons entre os orbitais do átomo, colocam-se, então, as flechas sobre barras que simbolizam os orbitais. [...] Esta forma de representação da configuração eletrônica é usualmente chamada de **diagrama orbital**. (BRADY & HUMISTON, 1986, p. 95)

Imaginemos que o orbital seja representado por uma “caixa” e o elétron, por uma seta. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 229)

As citações acima evidenciam que os livros convencionam que, a partir dali, quando, por exemplo, linhas horizontais contendo ou não setas forem empregadas, elas devem ser compreendidas como representando orbitais. Esse esclarecimento feito pelos livros está em consonância com a descrição semiótica de um símbolo, cujo significado deve ser previamente convencionado ao intérprete do signo. Ainda que um signo não se manifeste de forma pura, apresentando aspectos simbólicos, icônicos e indiciais, constata-se que há predominância do primeiro aspecto nessa representação. É pertinente salientar que, na categoria *representação icônica do orbital*, nenhum dos livros investigados faz um esclarecimento análogo ao feito na presente categoria, isto é, não se convencionam que as imagens dos orbitais são de natureza simbólica, ainda que não nesses termos. Isso sugere diferentes compreensões em relação às representações dos orbitais por diagramas e por imagens, por parte dos autores dos livros didáticos, mas essas diferenças não são explicitadas aos estudantes.

6.5.2.1.2. A equivalência ontológica entre orbitais vazios e preenchidos

Outro ponto a ser destacado nas citações acima, sobre as convenções utilizadas na representação de orbitais, também está presente nos demais livros. Trata-se da sugestão de duas ontologias distintas ou, em outros termos, da sugestão de dois objetos aparentemente diferentes dos quais as representações tomam lugar: o orbital, representado por uma caixa ou linha horizontal, e o elétron, representado por uma flecha. Nesse contexto, os diagramas sugerem ao leitor a concepção de que orbitais vazios, representações sem o acréscimo de setas, são entidades preexistentes e, por consequência, reais. As Figuras 14, 15, 16 e 17 sugerem uma igualdade ontológica entre os orbitais preenchidos e os orbitais vazios, exceto pelas ilustrações de Quagliano e Vallarino (Figuras 14 e 15 **(b)**), em que a representação de um orbital vazio é distinta da representação de um orbital preenchido⁵⁷. Além disso, podemos observar o emprego de orbitais vazios em diversos contextos nos quais se corrobora sua igualdade com os orbitais preenchidos:

⁵⁷ Quagliano e Vallarino (1979) representam os orbitais preenchidos como circunferências contínuas, e os orbitais vazios como circunferências tracejadas.

Embora qualquer átomo possua um grande número de camadas, sub-camadas e orbitais, esses podem ou não ser ocupados, dependendo da população eletrônica. (HARDWICK, 1965, p. 143, grifo nosso)

[...] há quatro orbitais na camada L, podendo cada um deles estar vazio ou ocupado por um ou dois elétrons. (PAULING, 1967, p. 233, grifo nosso)

[...] necessitamos das configurações eletrônicas dos átomos gasosos dos elementos, que nos fornecem os orbitais atômicos que são ocupados por elétrons. Para conseguir estas configurações eletrônicas, imaginamos primeiro um núcleo atômico de carga apropriada, rodeado por orbitais atômicos vazios. Depois, introduzindo elétrons nesses orbitais, preenchendo-os em ordem de energia crescente, [...], cada orbital pode conter somente dois elétrons nesses orbitais preenchendo-os em ordem de energia crescente [...]. (MAHAN, 1970, p. 327, grifo nosso)

No estado fundamental, de um átomo ou íon, os elétrons tendem a ocupar, em ordem de energia crescente, os orbitais disponíveis, a começar do orbital de mais baixa energia. Essa regra, chamada “princípio de construção”, reflete o fato de que os elétrons tendem a ocupar primeiramente os orbitais que estão mais próximos ao núcleo e, então, possuem a maior atração pelo núcleo [...]. (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, p. 232, grifo nosso)

[...] imaginamos um orbital 1s como sendo *ocupado* por um elétron. De certa forma, é como se víssemos o átomo como um “edifício garagem” para elétrons, onde cada orbital é uma “vaga” com uma energia e uma forma de onda particular. Quando um elétron está numa destas vagas, ele possui a energia e a forma da onda deste orbital particular. (BRADY & HUMISTON, 1986, p. 92)

A maioria das citações acima descreve o preenchimento de orbitais de modo abstrato, com exceção da passagem de Brady e Humiston (1986), na qual esses autores fazem uma analogia com uma entidade macroscópica (um edifício garagem) para descrever o preenchimento dos orbitais. Desse modo, sugere-se ao leitor uma possível correspondência concreta (no sentido de possuírem estatutos ontológicos iguais) entre duas entidades, uma no nível macroscópico (edifício garagem) e outra no nível submicroscópico (orbitais). Ou seja, pode-se interpretar que um orbital seria tão real quanto uma garagem de um edifício, que é percebida por nossos sentidos. Além disso, tal analogia sugere duas entidades distintas, a garagem e o carro: a primeira, análoga ao orbital, e a segunda, análoga ao elétron. O emprego de analogias e metáforas é amplamente identificado no Ensino de Ciências devido à sua importância no processo de ensino-aprendizagem, pois podem aproximar o conhecimento científico e a realidade dos estudantes. No entanto, quando não há esclarecimentos quanto a seus limites, os estudantes de ciências podem interpretar as analogias e metáforas de modo quase literal, gerando obstáculos ao aprendizado.

Nas citações acima, que fazem referência aos orbitais vazios, os autores têm como principal objetivo discutir o princípio de Aufbau (Figura 17). Entretanto, em outros tópicos,

tais como ligação química, também é possível notar a utilização do conceito de orbital vazio nas explicações:

[...] mesmo depois de todos os orbitais de valência “semipreenchidos” de um átomo ficarem envolvidos na ligação, a molécula resultante ainda será reativa se o átomo possuir outros orbitais de valência completamente vazios. [...] As ligações formadas por moléculas contendo átomos com orbitais de valência vazios são muito importantes. (PIMENTEL & SPRATLEY, 1974, p. 492-493, grifo nosso)

De acordo com Lewis, ácido é uma espécie com um orbital vazio capaz de aceitar um par de elétrons, enquanto base é uma espécie que pode doar um par de elétrons para formar uma ligação covalente coordenada (seção 8-2). (RUSSELL, 1981, p. 395, grifo nosso)

Se um orbital está vazio e o outro cheio, ambos os elétrons podem vir do orbital cheio e forma-se uma ligação covalente coordenada. Assim, podemos imaginar a ligação covalente coordenada no íon amônio como sendo formada pela superposição de um orbital 1s vazio centrado num próton (um íon hidrogênio, H^+) com um orbital completamente cheio de um par isolado no nitrogênio de uma molécula de amônia. O par de elétrons é, então, partilhado na região de superposição dos orbitais. (BRADY & HUMISTON, 1986, p. 172, grifo nosso, itálico no original)

[...] é uma base de Lewis e o par de elétrons isolado sobre o carbono forma ligações covalentes com os átomos do bloco d e com íons. É também um ácido de Lewis, porque o seu orbital antiligante π vazio pode aceitar densidade eletrônica de um metal (Fig. 14.39) [Figura 11 (**d**)]. (ATKINS & JONES, 2001, p. 721)

No âmbito da ligação química, as representações dos orbitais vazios podem ocorrer, também, na forma de representações icônicas, com o intuito de subsidiar as explicações sobre a formação da ligação entre orbitais cheios e orbitais vazios. Como exibido na Figura 11, alguns livros de Química Geral do século XX representam iconicamente os orbitais vazios. As representações icônicas e simbólicas do orbital vazio são utilizadas com diferentes finalidades, e destacam distintos aspectos. A representação icônica salienta a forma do orbital; a representação simbólica, na forma de diagramas de energia de orbitais, ressalta a energia associada ao orbital.

Os exemplos anteriores mostram a ampla presença do conceito de orbital vazio nos livros didáticos de Química Geral, refletindo seu papel de destaque na Química e no Ensino de Química, como já mencionado por Ogilvie (1990). Apesar de sua importância, não se observam considerações ontológicas e epistemológicas suficientes sobre esse conceito nos livros. Apenas uma pequena parcela dos livros investigados esclarece o significado ontológico e epistemológico de um orbital vazio:

Embora seja útil descrever átomos qualitativamente, dizendo que estes são elétrons “em” certos orbitais, e, embora algumas vezes possa ajudar a ideia de que os átomos são construídos colocando-se elétrons num conjunto de orbitais vazios, esta *linguagem* não deve ser tomada muito ao pé da letra. Os orbitais de um átomo não constituem um jogo de “caixinhas” rigidamente colocados numa escala energética, como a Fig. 10-18 parece sugerir.

Quando dizemos que um elétron está “num orbital”, queremos significar apenas que um elétron está se comportando duma certa maneira e, neste sentido, um orbital só terá existência física se um elétron estiver “dentro” dele. (MAHAN, 1970, p. 328, grifo nosso)

[...] um orbital vazio ou não ocupado seria um nível energético potencial disponível, sem conter elétron. (RUSSELL, 1981, p. 146, grifo nosso)

Os orbitais não são coisas ou caixas onde se possam colocar os elétrons. Não é, a rigor, conceitualmente correto dizer que os elétrons estão num orbital ou ocupam um orbital, embora estas expressões sejam comumente usadas na linguagem corrente. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 229, grifo nosso)

Das três citações, talvez a de Kotz e Treichel (1998) seja a que menos esclarece sobre o significado ontológico e epistemológico de um orbital vazio, pois somente descreve que não é correto dizer que o elétron ocupa um orbital, sem explicitar o significado de um orbital vazio. Mahan (1970) sugere que um orbital vazio não existe, ao afirmar que ele só tem *existência física* quando o elétron está *dentro* dele. O mesmo autor também expressa a concepção de que o orbital é uma propriedade do elétron, isto é, um comportamento que ele exibe em certas condições, o que não é explicitado na maioria dos livros. Por fim, no livro de Russell (1981), há claramente uma afirmação a respeito do estatuto ontológico de um orbital vazio. Segundo esse autor, um orbital vazio é somente um estado potencial ou virtual, sem existência concreta.

Em termos semióticos, um mesmo objeto pode ser representado por diferentes signos, assim como uma mesma representação pode se referir a diferentes objetos. Além disso, os objetos podem ser somente imagináveis (hipotéticos). Contudo, na ausência de esclarecimentos sobre o significado de certas representações, bem como sobre possíveis relações entre elas, é natural considerar que signos distintos se referem a objetos distintos. Ou seja, se os orbitais são representados por linhas horizontais ou caixas, e os elétrons são representados por setas, haverá uma tendência a considerá-los como entidades distintas. Daí, a naturalização, isto é, o emprego não problemático, do conceito de orbital vazio se consolida, associada à concepção de que o orbital é independente do elétron. Mulder (2010; 2011) afirma que esse entendimento é sugerido pelas representações icônicas dos orbitais por superfícies limites. Nossa análise revela que as representações simbólicas dos orbitais por diagramas também reforçam essa concepção. Embora os símbolos tenham um papel de referencialidade inferior aos ícones e índices, ou, nos termos de Grosholz e Hoffman (2000), sejam mais *tolerantes* ou *relativistas* quanto à importância ontológica, eles contribuem para a atribuição de realidade aos orbitais vazios e, também, para a compreensão do orbital como uma entidade independente do elétron.

Essa questão se torna ainda mais complexa quando se observa que o objetivo dos livros de Química Geral, ao representar simbolicamente o orbital por uma caixa nos diagramas de energia, é salientar que para cada orbital há uma energia associada. Dessa maneira, as representações simbólicas de orbitais vazios sugerem também a existência de níveis de energias que são independentes do elétron.

Pode-se concluir que, em linhas gerais, os livros de Química Geral não problematizam ontológica e epistemologicamente o conceito de orbital vazio, nem o significado das representações simbólicas e icônicas relacionadas a esse conceito. Há que se ter em mente que qualquer perspectiva ontológica adotada em relação ao orbital vazio implicará em consequências epistemológicas particulares que, por sua vez, refletirão no ensino e aprendizagem deste conceito.

6.5.2.2. Diagramas de energia de orbitais

Com o intuito de representar as diferenças de energia entre os orbitais, os livros de Química Geral recorrem aos diagramas de energia em que os orbitais são ordenados verticalmente conforme o aumento de energia:

Figura 18 – Diagramas de energia de orbitais em: **(a)** Mahan (1970); **(b)** Brady e Humiston (1986); **(c)** Brown, LeMay e Bursten (1999); **(d)** O'Connor (1977)

Como visto na categoria *base conceitual do orbital*, os livros de Química Geral atribuem, em conjunto com a ideia amplamente difundida de que o orbital é uma distribuição espacial do elétron ao redor do núcleo, a compreensão de que ele possui uma dada energia, ou, nos termos dos livros, de que o orbital se refere, também, a um nível de energia. Daí a representação dos orbitais por meio de diagramas de níveis de energia. Esse aspecto se encontra em segundo plano nos debates sobre o estatuto ontológico e epistemológico do orbital, principalmente sobre a definição de orbital (**Capítulo 2**). Nesses debates, as considerações ontológicas e epistemológicas referem-se essencialmente à componente espacial do orbital, com ênfase para as representações icônicas, omitindo-se a componente energética do orbital, que é objeto das representações simbólicas. Essa constatação reforça o maior apelo das representações icônicas, em comparação com as simbólicas, quando se pensa no estatuto ontológico dos orbitais, pois nas representações simbólicas não há sugestão ou indicação direta do objeto.

Os diagramas de energia prosseguem a escala ascendente de aspectos simbólicos iniciada na configuração eletrônica parcial e incrementada nos diagramas orbitais. Os diagramas de energia incluem todos os aspectos contidos nas outras duas formas de representações, mas acrescentam as energias de cada orbital, bem como a diferença de energia entre eles, por meio de um eixo de energia. Desse modo, seria razoável esperar que os diagramas de energia fossem utilizados também em casos em que as outras representações são empregadas, como, por exemplo, na demonstração do princípio de Aufbau ou de construção. Contudo, poucos são os livros que utilizam os diagramas de energia para tal finalidade: a maioria se restringe a ilustrar os diferentes níveis de energia dos orbitais.

De acordo com a perspectiva semiótica da mútua complementaridade dos signos, ainda que haja um conjunto de aspectos em comum numa gama de representações, os poucos aspectos que distinguem uma representação da outra fazem com que cada uma delas tenha, preferencialmente, um emprego particular. Assim, recorreremos à representação que fornece mais facilmente a informação particular em que estamos interessados.

Tendo isso em vista, investigamos a questão de como os livros descrevem a obtenção dos níveis de energia. Os livros da Tabela 6 que mencionam a equação de Schrödinger descrevem que os níveis de energia são obtidos, juntamente com as funções de onda Ψ , pela resolução dessa equação. Como visto na categoria *base conceitual do orbital*, os livros de Química Geral indicam diferentes estatutos epistemológicos para as soluções da equação de Schrödinger de espécies monoelétrônicas e polieletrônicas: as primeiras têm soluções exatas; e as segundas, soluções aproximadas. Entretanto, não há menção explícita nos livros a diferenças entre os cálculos teóricos e os observados

experimentalmente para os níveis de energia. A maioria dos livros não considera importante a indicação de valores numéricos das energias, nem mesmo sua ordem de grandeza. Mais uma vez, a abordagem qualitativa adotada pelos livros explica essa opção; porém, as consequências ontológicas e epistemológicas da Mecânica Ondulatória parecem ser objeto de pouca reflexão por parte dos autores dos livros didáticos.

A indicação relativa ou qualitativa dos níveis de energia dos orbitais é comum à maioria dos diagramas nos livros analisados, tal como ilustrado pela Figura 18. Como se pode observar nessa figura, não há preocupação quanto ao valor exato, ou mesmo aproximado, para cada nível de energia nos diagramas, apenas se especificando no eixo vertical que há aumento de energia dos orbitais de baixo para cima. Assim, a maioria dos livros não explicita em seus diagramas de energia que os níveis são convencionalmente considerados menores que zero (valores negativos de energia) quando $n < \infty$. Um dos poucos livros a quantificar, ainda que aproximadamente, as energias dos orbitais, bem como a apontar que estas são negativas, é o de Pimentel e Spratley (1974):

Figura 19 – Diagrama de energia de orbitais em Pimentel e Spratley (1974)

O diagrama de energia de orbitais da Figura 19 destoa da maioria dos diagramas presentes nos livros de Química Geral, que se caracterizam por abarcar poucas informações. O diagrama de Pimentel e Spratley (1974), porém, exhibe simultaneamente: i) a quantificação aproximada de cada nível de energia; ii) a informação de que, no átomo de hidrogênio, os níveis de energia com mesmo número quântico principal possuem a mesma

energia, enquanto que, no átomo de hélio, os níveis de energia com mesmo número quântico principal, mas diferentes números quânticos de momento angular, possuem diferentes energias; *iii*) a informação de que quanto maior o número atômico, mais baixa é a energia do orbital; *iv*) a informação de que a distância relativa entre os níveis de energia varia conforme o átomo em questão, ou, mais precisamente, conforme o número atômico.

Jenkins (2003) argumenta que o recurso a diagramas de energia essencialmente qualitativos, sem rigor quanto à quantificação ou indicação aproximada das energias dos orbitais, não seria um obstáculo para a sua utilização nos livros didáticos, considerando o contexto e tipo de explicação pretendida. O contexto dos livros de Química Geral abrange estudantes que buscam diferentes formações e que estão tendo contato com a Química do Ensino Superior pela primeira vez. O tipo de explicação pretendida com os diagramas se refere às relações energéticas entre os diferentes orbitais e, também, como é à ordenação de suas energias. Em pesquisas em Química Quântica, o emprego desse tipo de diagrama de energia seria inadequado, dado o nível de formação dos pesquisadores que fariam uso deles (contexto) e o compromisso com a precisão numérica (tipo de explicação).

Os diagramas de energia de orbitais da Figura 18 **(c)** e os da Figura 18 **(a)**, **(b)** e **(d)** diferem quanto à ordenação dos níveis de energia, pois se referem a diferentes entidades. Espécies monoelétrônicas resultam em diagramas semelhantes aos da Figura 18 **(c)**, com a ressalva de que, conforme o aumento do número atômico, as distâncias relativas entre os níveis aumentam, assim como as respectivas energias se tornam mais negativas. Por outro lado, espécies polieletrônicas resultam em diagramas semelhantes aos das Figuras 18 **(a)**, **(b)** e **(d)**. De fato, a particularidade de seus níveis de energia depende não somente do número atômico, como no primeiro caso, mas, também, dos elétrons presentes no átomo. Essa conjugação de variáveis produz diagramas de níveis de energia particulares para cada átomo, isto é, com energias, distâncias relativas e ordenação dos níveis de energia específicos para cada átomo. Entretanto, não se salienta, na maioria dos livros, que cada átomo ou íon possui níveis energéticos particulares, nem que a distância relativa entre esses níveis varia conforme o número atômico. Um dos poucos livros a explicitar isso, ainda que brevemente, é Mahan (1970):

[...] cada átomo e íon tem um jogo particular de níveis energéticos, determinado por sua carga nuclear e número de elétrons. Em consequência, a energia conjugada com determinado orbital depende dos outros orbitais que estão ocupados e não é a mesma para todos os átomos. Assim, o modelo de energia dos orbitais reproduzido na Fig. 10.18 [Fig. 18 **(a)**], embora útil, tem apenas significado qualitativo. (MAHAN, 1970, p. 328)

6.5.2.2.1. Diagramas de energia de espécies monoelétrônicas

Os diagramas de energias de espécies monoelétrônicas aparecem em poucos dos livros didáticos de Química Geral. Um deles é Russell (1981), que tece as seguintes considerações:

Os níveis de energia unieletrônicos, que iremos descrever, são níveis energéticos do tipo encontrado no *hidrogênio*; isto é, são semelhantes aos níveis obtidos por cálculos mecânico-quânticos para um átomo unieletrônico, o hidrogênio. Isto pode parecer uma super simplificação, porém resolve o problema muito bem. (RUSSELL, 1981, p. 144)

Há, na passagem acima, ênfase para o fato de que esses diagramas são simplificações – as quais, no entanto, não são caracterizadas. Como já citado anteriormente, esses diagramas não exprimem, por exemplo, que conforme o aumento do número atômico, menor é a energia do orbital, e maiores as distâncias relativas entre os orbitais. Apesar disso, a ordenação dos níveis de energia se preserva em espécies monoelétrônicas, o que também não está caracterizado na citação acima.

Também são poucos os livros que expõem que as energias previstas pelo modelo de Bohr para espécies monoelétrônicas são confirmadas experimentalmente de maneira tão precisa quanto as da Mecânica Ondulatória, embora cada uma delas se fundamente em diferentes considerações ontológicas e epistemológicas sobre o comportamento do elétron:

[...] ambos os modelos dão excelente concordância com os resultados experimentais, no caso do átomo mais simples, o hidrogênio, mas o modelo de Bohr mostrou-se completamente insatisfatório para situações mais complexas. A Mecânica Quântica tem sido capaz de se aproximar mais dos valores experimentais de espectros de muitas espécies diferentes, embora a complexidade matemática e a necessidade de fazer varias aproximações requeiram computadores de alta velocidade. (O'CONNOR, 1977, p. 51)

Esses livros ainda descrevem que a equação de Bohr para a energia de uma dada *órbita*, com número quântico n , pode ser utilizada para se determinar as energias dos orbitais em espécies monoelétrônicas, que também são dependentes do número quântico principal. Lembramos, tal como indicado no início desta seção, que a maioria dos livros apresenta a equação da energia das órbitas de Bohr e, além disso, especifica que a equação prevê, com boa concordância com os resultados experimentais, as diferenças de energia de espécies monoelétrônicas, como o H, He⁺ e Li²⁺.

Constata-se que os diagramas de espécies polieletrônicas estão muito mais presentes nos livros Química Geral que os diagramas de espécies monoelétrônicas, embora os autores não justifiquem essa preferência. Em nosso entendimento, tal opção pode ser atribuída à diversidade e quantidade de espécies polieletrônicas na Natureza, de modo que o estudo de espécies monoelétrônicas pelos químicos pode ser considerado uma exceção.

6.5.2.2.2. Diagramas de energia de espécies polieletrônicas

De maneira geral, se observa nos livros que os diagramas de espécies polieletrônicas diferem na ordenação das energias dos orbitais em comparação com os diagramas de espécies monoelétrônicas. Essa distinção é feita, preliminarmente, por meio dos números quânticos: a ordenação dos níveis de energia de espécies monoelétrônicas depende somente do número quântico principal n ; ao passo que, em espécies polieletrônicas, essa ordenação depende tanto do número quântico principal n quanto do número quântico de momento angular, ℓ . Tal distinção não é explicitada pelos autores quando da apresentação da configuração eletrônica parcial nem, posteriormente, dos diagramas de orbitais para os diferentes níveis de energia. Embora haja a indicação prévia de que a energia do orbital depende do número quântico n , as representações não mostram que, em espécies polieletrônicas, as energias dependem também de ℓ , conforme os subníveis s , p , d ou f . Isso somente é mostrado nos diagramas de energia de espécies polieletrônicas.

A indicação preliminar relativa à origem das diferentes ordenações de energia em espécies polieletrônicas, se comparadas às espécies monoelétrônicas, não proporciona o entendimento dos fenômenos que estão por trás desses diferentes diagramas. A maioria dos livros apresenta, inicialmente, explicações semelhantes à que segue:

Nos átomos ou íons que contêm dois ou mais elétrons (átomos e íons polieletrônicos) dois fatores contrários mais importantes determinam a energia total do sistema núcleo-elétron – a atração eletrostática total entre o núcleo e todos os elétrons e as forças de repulsão entre os próprios elétrons. [...] o estado fundamental de um átomo ou íon polieletrônico representa, na verdade, um equilíbrio entre esses dois efeitos opostos; os elétrons ficam tão perto do núcleo (máxima possível atração eletrostática) quanto seja compatível com as suas repulsões mútuas (mínima possível repulsão elétron-elétron). (QUAGLIANO & VALLARINO, 1979, p. 229)

A preponderância de explicações clássicas nos livros de Química Geral, como a citada acima, está de acordo com a opinião de Labarca e Lombardi (2010), para quem os químicos apreendem a Mecânica Quântica à sua maneira: a descrição do comportamento dos elétrons em espécies polieletrônicas se dá, preferencialmente, através da descrição eletrostática e corpuscular entre as atrações núcleo-elétron, e repulsões elétron-elétron. Caracteriza-se, portanto, a utilização de um modelo clássico, mas genuíno e adequado aos propósitos dos químicos.

Observa-se, também, que o enquadramento ontológico se dirige ao elétron, e não ao orbital, nos livros didáticos. Dessa forma, sugere-se a concepção de que a origem dos diferentes níveis de energia dos orbitais está na relação elétron-elétron e elétron-núcleo no

átomo e, portanto, que os níveis de energia são uma propriedade do elétron (MULDER, 2010; 2011).

Descrições como essas tratam de maneira indistinta os elétrons nos átomos, isto é, não especificam que os elétrons de um dado subnível (*s*, *p*, *d* ou *f*) de energia têm comportamentos espaciais particulares, como mostram as representações icônicas dos orbitais. Isso explicaria por que as repulsões levam a ordenações diferentes das energias dos orbitais em espécies polieletrônicas. Visando especificar essas diferenças, alguns livros de Química Geral, principalmente da última década do século XX, recorrem aos conceitos de blindagem e carga nuclear efetiva (Z^* ou Z_{ef}), como se exemplifica na citação a seguir:

O grau de blindagem de um elétron pelo outros elétrons depende da distribuição dos elétrons no entorno do núcleo. [...] Um elétron num orbital 3s tem maior probabilidade de estar perto do núcleo do que um outro num orbital 3p; por sua vez, um elétron num orbital 3p tem maior probabilidade de estar perto do núcleo do que outro num orbital 3d. Então, os elétrons 3s são os menos blindados e os elétrons 3d os mais blindados. Por isso, os elétrons 3s sofrem carga efetiva Z_{ef} maior do que os elétrons 3p, que por sua vez sofrem carga efetiva Z_{ef} maior do que os elétrons 3d. [...] Ora, a energia de um elétron depende da carga nuclear efetiva, Z_{ef} . Como Z_{ef} é maior para os elétrons 3s, estes elétrons têm energia mais baixa (são mais estáveis) do que os elétrons 3p, que por sua vez têm energia mais baixa do que os elétrons 3d. (BROWN, LEMAY & BURSTEN, 1999, p. 131)

Como podemos observar nesta citação, os conceitos de blindagem e carga nuclear efetiva são empregados para explicar as diferenças de energia de orbitais com diferentes números quânticos de momento angular, simbolizados pelas letras *s*, *p*, *d* e *f*. Diferentemente dos livros que recorriam simplesmente à abordagem clássica da repulsão intereletrônica para caracterizar os diagramas polieletrônicos, a explicação por meio da carga nuclear efetiva e da blindagem se fundamenta no conceito de densidade de probabilidade da Mecânica Ondulatória.

Assim, nota-se um começo de deslocamento de explicações essencialmente clássicas em direção a explicações que se baseiam cada vez mais na Mecânica Ondulatória de Schrödinger e, particularmente, nas compreensões qualitativas de seus constructos matemáticos. Esse deslocamento não refuta a observação de Lombardi e Labarca (2010), pois ainda se constata um uso particular da Mecânica Ondulatória nos livros, a saber, a identificação do orbital com a densidade de probabilidade. Na perspectiva desses autores, essa explicação é de caráter semi-clássico, pois a diferença entre os níveis de energia do elétron não é explicada apenas eletrostaticamente, mas, também, por uma equação que determina sua posição estatisticamente e que conduz a diferentes distribuições espaciais conforme o orbital em questão.

Além disso, identifica-se na citação de Brown, LeMay e Bursten (1999), mais uma vez, a sugestão de duas ontologias, exemplificada pela passagem *um elétron num orbital*. O

que se revela é a fusão de aspectos e modos de comunicação oriundos de diferentes representações do orbital em uma única compreensão. Ao não se distinguir os aspectos particulares comunicados em cada representação, bem como seus limites, potencialidades e objetivos, fusões indevidas podem ocorrer, conduzindo, eventualmente, a compreensões ontológicas e epistemológicas não desejadas pelos autores.

Pode-se apontar, também, que alguns livros sugerem que as energias dos orbitais são obtidas, essencialmente, por investigações experimentais:

Havíamos considerado que todos os elétrons de uma dada camada têm a mesma energia, o que não é verdade. Estudos dos espectros de diferentes elementos indicam que cada nível de energia da Fig. 3.13 é formado, na realidade, por vários níveis de energia estreitamente agrupados. Tecnicamente, diz que cada *camada principal* consiste em uma ou mais *subcamadas*, ou subníveis de energia. (SIENKO & PLANE, 1968, p. 56, grifo nosso).

[Embora] as energias de diferentes subníveis nos átomos não possam ser calculadas com exatidão, suas grandezas relativas podem ser obtidas de experiências e são qualitativamente bastante similares em átomos diferentes. (MASTERTON & SLOWINSKI, 1978, p. 115, grifo nosso)

A subdivisão das camadas em subcamadas provém dos estudos dos espectros atômicos. A subdivisão das camadas em subcamadas se dá pelo fato dos elétrons num átomo não serem independentes uns dos outros, mas interagirem eletricamente. Até mesmo o átomo de hidrogênio com apenas um elétron demonstra este desdobramento dos níveis de energia na presença de um campo elétrico. (É o chamado *efeito Stark*). (RUSSELL, 1981, p. 145, grifo nosso)

[...] é importante ter em mente que a visão da configuração dos elétrons nos átomos provém da experiência. O modelo ondulatório do átomo é uma tentativa que tem êxito apreciável na racionalização das observações experimentais. (KOTZ & TREICHEL, 1998, p. 231, grifo nosso)

Essas citações descrevem que as energias dos orbitais, ainda que não mencionem explicitamente esse conceito, são determinadas por meio da análise dos espectros atômicos, ou, em outros termos, são provenientes de determinações experimentais relativas à absorção ou emissão de comprimentos de onda bem definidos dos átomos em estudo. Vale destacar que quase todos os livros investigados apresentam os estudos espectroscópicos do final do século XIX e começo do século XX como base para a discussão da teoria atômica de Bohr. No entanto, na discussão da Mecânica Ondulatória, esses estudos têm papel secundário.

Vimos que, no caso de espécies monoelétrônicas, alguns livros expõem que as energias dos orbitais são previstas pela teoria de Bohr. No caso de espécies polieletrônicas, constata-se que nenhuma equação relativa aos níveis de energia dos orbitais é incluída na discussão. Se, no primeiro caso, existe algum amparo teórico ao que é obtido experimentalmente, no segundo, resta-nos a dúvida quanto a isso. Pode-se dizer que os

diagramas de orbitais polieletrônicos são introduzidos sem maiores esclarecimentos quanto à sua origem e sua relação com a teoria.

Apesar de a maioria dos livros didáticos não dar destaque aos estudos espectroscópicos no contexto da Mecânica Ondulatória, essas investigações experimentais subsidiam a determinação da função de onda Ψ em espécies polieletrônicas, para as quais não é possível obter, nos termos dos próprios livros, uma solução analítica da equação de Schrödinger.

Como mencionado anteriormente, a solução da equação de Schrödinger conduz à função de onda Ψ e à energia relacionada a esse estado. No caso do átomo de hidrogênio, o caso exemplar de uma espécie para a qual é possível obter uma solução analítica, podemos calcular as energias dos seus estados por métodos *ab initio*, isto é, métodos que se munem unicamente de primeiros princípios para obter as energias e as funções de onda Ψ . Quando comparamos os valores de energia obtidos para o átomo de hidrogênio a partir desse método, observamos que são muito próximos dos valores obtidos experimentalmente – mas não exatos, como sugerem os livros. No entanto, em espécies polieletrônicas, cálculos *ab initio* das energias dos orbitais, bem como da função de onda Ψ , tornam-se impraticáveis, devido à impossibilidade de se obter uma solução analítica para a equação de Schrödinger – oriunda do problema dos três corpos e, também, de fenômenos tipicamente quânticos. Nesses casos, recorre-se a métodos semi-empíricos, isto é, alimentam-se os cálculos com dados obtidos experimentalmente, em particular com as energias dos estados determinadas espectroscopicamente, para se determinar a função de onda Ψ ou as funções de um dado estado de energia. Assim, as energias determinadas para cada nível de energia de um átomo ou íon específico subsidiam a construção de suas funções de onda (SCHWARZ, 2006). Os níveis de energia de espécies polieletrônicas podem ser determinados por métodos *ab initio*, tal como se faz no modelo orbital; no entanto, isso resulta em uma grande divergência entre os cálculos teóricos e os resultados experimentais.

O que se nota nesse e em outros contextos é uma ênfase nas potencialidades da Mecânica Ondulatória por parte dos livros didáticos de Química Geral, mas omitindo seus limites e sua relação com as teorias que a precederam e contribuíram para sua construção. Como destacou Labarca (2010; SCERRI & McINTYRE, 2006), os êxitos da Mecânica Quântica durante o século XX garantiram a ela grande confiança por parte dos cientistas, e sua importância se reflete nos livros. Entretanto, ao enfatizar suas potencialidades, sugere-se que a explicação mecânico-quântica é útil e adequada em qualquer contexto, apoiando a ideia de que exista a melhor explicação. Assim, não só a questão do uso contextual e particular de cada modelo científico, cada qual com objetivos próprios de uso (JENKINS,

2003; LABARCA, 2006), é ofuscada, mas, também, sugere-se que a Química pode em princípio ser reduzida à Física (SCERRI, 2000b; LABARCA, 2006).

6.6. *As relações entre as categorias investigadas: subsídios para a construção de representações e comunicação do conhecimento químico*

Na categoria *base conceitual do orbital*, delineamos os alicerces ontológicos e epistemológicos da Mecânica Quântica e, especialmente, do conceito de orbital. Verificamos que a maioria dos livros de Química Geral concebe os orbitais como regiões onde é mais provável se encontrar um elétron, em termos de densidade de probabilidade. Por sua vez, ainda que em menor extensão, os livros didáticos indicam que a essas regiões são associadas energias particulares. Cada um desses aspectos subsidia a produção, em linhas gerais, de dois modos distintos de representação do conceito de orbital: a icônica; e a simbólica.

No âmbito da categoria *representação icônica do orbital*, notamos que as representações dos orbitais, em sua maioria, são descritas como se referindo a regiões de densidade de probabilidade máxima (ou elevada), exemplificadas pelas representações dos orbitais por superfícies limites. Essas representações destacam a distribuição espacial, especialmente as formas e natureza direcional dos orbitais, preconizadas na base conceitual do orbital. A natureza semiótica dessas representações icônicas é sugerir a realidade do objeto representado por meio de qualidades que remetem a ele.

Por outro lado, a *representação simbólica do orbital*, exemplificada pelo uso de diagramas, destaca a energia associada ao orbital. A natureza semiótica de um símbolo corresponde a um significado estabelecido por convenção. Nos livros, convencionou-se que caixas ou linhas horizontais representam orbitais, enquanto setas representam elétrons. Diante da enunciação sucinta sobre o significado do símbolo, o objetivo implícito de destacar os níveis de energia se dilui, abrindo margem para que o estudante interprete ou recorra, também, às demais ideias relacionadas ao conceito de orbital conhecidas por ele. Por consequência, enquanto a representação icônica se sustenta unicamente sobre a base conceitual, a representação simbólica do orbital, tal como a análise dos livros evidencia, pode recorrer tanto à base conceitual quanto à representação icônica.

Tendo isso em vista, a categoria *base conceitual do orbital*, proposta nesta dissertação, pode ser encarada como síntese do arcabouço teórico utilizado pelos livros para a construção das representações que visam comunicar esse conhecimento no Ensino de Química (SOUZA, 2012). Os livros de Química Geral se caracterizam pela transposição didática do conhecimento Químico, com contextos de uso e objetivos diferentes daqueles da

pesquisa em Química. No entanto, a relação entre a fundamentação teórica e as representações, identificada nos livros didáticos, se mantém na pesquisa em Química, como aponta Souza (2012), revelando sua importância tanto para a Química quanto para o Ensino de Química.

O que se observa, na maioria dos livros de Química Geral do século XX, é uma falta de rigor na relação entre o arcabouço teórico e as representações produzidas com base nele. Em alguns casos, o arcabouço teórico inclui considerações ontológicas e epistemológicas que implicam nas representações produzidas, mas não há indicação explícita das consequências daquelas considerações sobre as representações – ficando a cargo do estudante a tarefa de estabelecer essas conexões. Em outros casos, aspectos destacados no arcabouço teórico não se encontram suficientemente realçados nas representações produzidas, conduzindo a ambiguidades quanto ao seu significado. É possível ainda notar, em outra parcela de livros, que é o próprio arcabouço teórico que se revela ambíguo, o que, naturalmente, leva à produção de representações ambíguas. Finalmente, há casos em que as representações não são adequadamente fundamentadas no arcabouço teórico, de modo a não justificar sua natureza e não evidenciando suas potencialidades e limites.

CAPÍTULO 7 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os livros de Química Geral do século XX, especialmente os da segunda metade desse período, podem ser considerados representativos das compreensões ontológicas e epistemológicas sobre os orbitais, partilhadas pela comunidade de químicos. Nesta dissertação, foram identificadas algumas dessas compreensões, que foram divulgadas para diversas gerações de químicos e professores de Química brasileiros. Não obstante, considerando a influência científica dos EUA, onde se originou a maior parte dos livros analisados, pode-se generalizar os resultados aqui obtidos para uma comunidade mais ampla do que a brasileira.

O que se observa nos livros é uma introdução não problematizada do conceito de orbital. Não é somente a questão do estatuto ontológico do orbital que se está deixando de problematizar por parte dos livros, mas também o alcance e os limites de tal conceito, bem como os significados de suas representações, cada qual visando destacar determinados aspectos e objetivos.

As dimensões ontológica e epistemológica, tal como entendidas nesta dissertação, não são adequadamente delimitadas e discutidas pelos livros de Química Geral, isto é, não se explicita de maneira satisfatória quando as considerações se referem, de um lado, à Natureza e às entidades que a constituem, e, do outro, às teorias e modelos científicos empregados na sistematização, previsão e explicação da Natureza e das entidades que a constituem. De acordo com Kuhn (2009), teorias e modelos têm um papel na delimitação das entidades que constituem a Natureza, definindo o que existe e o que não existe. Entretanto, os livros didáticos de Química Geral acabam por sobrepor indiscriminadamente ontologia e epistemologia, o que pode acarretar, como esta pesquisa nos leva a supor, em concepções sobre o orbital indesejadas pelos autores dos livros.

Nesse contexto, compartilhamos da concepção de que o orbital é uma propriedade do elétron e, portanto, não possui existência independente (MULDER, 2010; 2010). Apesar disso, não rejeitamos a compreensão do orbital como uma entidade oriunda do conceito de densidade de probabilidade, tal como disseminado nos livros de Química Geral e, por sua vez, na Química. Em nossa perspectiva, o principal problema que se coloca é que os livros adotam implícita e irrefletidamente uma concepção para o orbital sem vislumbrar as consequências ontológicas e epistemológicas dessa escolha. Isso se reflete, muitas vezes, em dificuldades que são delegadas ao estudante, a quem caberá superá-las. Contudo, o mais provável é que essas contradições sejam assimiladas sem problematização pelos estudantes (LEMES, 2013).

Nos debates publicados nas páginas do *Journal of Chemical Education* (**Capítulo 2**), pôs-se em discussão se o conceito de orbital e, de modo geral, a Mecânica Ondulatória, devem ser ensinados em cursos de Química Geral. Aqueles que rejeitam o seu ensino argumentam que, ao deixar de lado a matemática subjacente ao conceito de orbital, compreensões alternativas são engendradas pelos estudantes. De fato, tal como nossa análise aponta, uma diversidade de concepções alternativas e conflitantes podem ser transmitidas pelos livros. No entanto, isso não nos leva a defender a exclusão dos orbitais e da Mecânica Ondulatória dos livros de Química Geral, considerando seus objetivos e a importância do conceito de orbital para a Química. Os livros de Química Geral devem, em nossa perspectiva, apresentar explicitamente aos estudantes suas compreensões ontológicas e epistemológicas a respeito do orbital, bem como a natureza das representações empregadas. É possível oferecer uma abordagem qualitativa explicitando ao estudante que há, também, uma estruturação matemática por trás do conceito de orbital, a qual tem implicações para o entendimento desse conceito. Obviamente, a aprendizagem do conceito de orbital não se restringe ao conteúdo dos livros, sendo desenvolvida em outras instâncias e ao longo da formação dos sujeitos, o que justifica uma abordagem qualitativa para esse conceito em cursos introdutórios. Diante desse quadro, pode-se notar que os livros publicados na última década do século XX começam a se orientar nesse sentido, mas ainda padecem dos problemas ontológicos e epistemológicos mencionados nesta dissertação.

Ainda que as obras investigadas tenham sido publicadas no século passado, os apontamentos desta dissertação em torno do conceito de orbital se revelam atuais, e podem ser utilizados no contexto do ensino de Química no que diz respeito aos seguintes aspectos: fornecer indícios quanto ao papel dos livros didáticos de Química Geral utilizados na atualidade para a compreensão do conceito de orbital por parte dos estudantes de química; e proporcionar reflexões de natureza ontológica e epistemológica sobre esse conceito, a fim de subsidiar futuras intervenções no ensino de química que visem conduzir os estudantes a compreensões mais elaboradas.

Há, ainda, aspectos sobre o conceito de orbital nos livros de Química Geral que não foram analisados aprofundadamente nesta dissertação e que podem ser objeto de pesquisas futuras. Um deles diz respeito a como as teorias quânticas da ligação química são introduzidas nos livros de Química Geral, particularmente a Teoria de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria de Orbitais Moleculares (TOM), visando identificar quais os elos estabelecidos entre essas teorias e a Mecânica Ondulatória, e se há diferenças entre as compreensões transmitidas sobre os orbitais nos diferentes tópicos.

Esta dissertação contribui, também, para fomentar os debates em Filosofia de Química em relação ao estatuto ontológico e epistemológico do orbital na Química. Levantamos indícios de que os químicos parecem se apropriar de modo peculiar dos conceitos provenientes da Mecânica Quântica. Assim, consideramos necessário um maior número de pesquisas com esse enfoque. Pesquisas futuras poderão se debruçar, por exemplo, em como as disciplinas de Química Quântica, em cursos de graduação em Química, contribuem para as compreensões ontológicas e epistemológicas dos estudantes sobre o orbital, comparando-as com as concepções adquiridas em cursos de Química Geral. De acordo com Lemes (2013), doutorandos em Química que cursaram disciplinas de Química Quântica, em sua maioria, mantêm compreensões análogas às identificadas nesta dissertação. Assim, a referida proposta de pesquisa se concentraria na investigação dos obstáculos que conduzem à manutenção das compreensões iniciais dos estudantes. Além disso, essa investigação permitiria entender melhor a relação entre a Química e a Química Quântica, bem como a apreensão que os químicos fazem desta disciplina.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRANTES, P. C. O que é Filosofia da Biologia? In: ABRANTES, P. C. (Org.). **Filosofia da Biologia**. Porto Alegre: ARTMED, 2011. p. 11-36.
- ABREU, R. G.; GOMES, M. M.; LOPES, A. R. C. Contextualização e tecnologias em livros didáticos de Biologia e Química. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 10, n. 3, p. 405-417, 2005.
- ALFONSO-GOLDFARB, A. M.; FERRAZ, M. H. M.; BELTRAN, M. H. R. A historiografia contemporânea e as ciências da matéria: uma longa rota cheia de percalços. In: ALFONSO-GOLDFARB, A. M.; BELTRAN, M. H. R. (Orgs.). **Escrevendo a história da ciência: tendências, propostas e discussões historiográficas**. São Paulo: Educ/FAPESP/Livraria da Física, 2004. p. 49-73.
- ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. Porto Alegre: Bookman, 2001. 914 p.
- BABOR, J. A. **Química general moderna**. 2. ed. Barcelona: Manuel Marín, 1943. 620 p.
- BACHELARD, G. **O pluralismo coerente da química moderna**. Rio de Janeiro: Contraponto, 2009. 211 p.
- BAVINK, B. **Introducción a la química general**. Barcelona: Labor, 1928. 181 p.
- BOGDAN, R.; BIKLEN, S. **Investigação qualitativa em educação: uma introdução à teoria e aos métodos**. Porto: Porto Editora, 1994. 336 p.
- BOLL, M. **Cours de chimie**. v. 1. Paris: Dunod, 1927. 571 p.
- BRADY, J. E.; HUMISTON, G. E. **Química Geral**. 2v. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1986. 661 p.
- BRASIL. **Lei n. 4.024, de 20 de dezembro de 1961**. Fixa as diretrizes e bases da educação nacional. Diário Oficial da União de 27.12.61, Brasília, DF: Brasil, 1961.
- _____. **Lei n. 9394/96 de 20 de dezembro de 1996**. Lei de Diretrizes e Bases da Educação Nacional. Diário Oficial da União nº 284 de 23.12.96, Brasília, DF: Brasil, 1996.
- BRINKLEY, S. R. **Principles of general chemistry**. 3rd. ed. New York: The Macmillan Company, 1944.
- BROWN, T. L.; LEMAY, H. E. Jr.; BURSTEN, B. E. **Química: Ciência Central**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1999. 702 p.
- CAMPOS, C.; CACHAPUZ, A. Imagens de ciência em manuais de química portugueses. **Química Nova na Escola**, n. 6, p. 23-29, 1997.
- CANZIAN, R.; MAXIMIANO, F. A. Princípio de Le Chatelier: o que tem sido apresentado em livros didáticos? **Química Nova na Escola**, v. 32, n. 2, p. 107-119, 2010.
- CHIBENI, S. S. Implicações filosóficas da microfísica. **Cadernos de História e Filosofia da Ciência**, Campinas, série 3, v. 2, n. 2, p. 141-164, 1992.
- _____. A inferência abdução e o realismo científico. **Cadernos de História e Filosofia da Ciência**, Campinas, série 3, v. 6, n. 1, p. 45-73, 1996.
- CHOPPIN, A. História dos livros e das edições didáticas: sobre o estado da arte. **Educação e Pesquisa**, São Paulo, v. 30, n. 3, p. 549-566, 2004.

- CRASNOW, S. L. How natural can ontology be? **Philosophy of Science**, v. 67, n. 1, p. 114-132, 2000.
- CUNHA, S. Estabilidade relativa de alcenos: análise dos critérios encontrados nos livros textos de graduação e uma proposta de explicação operacional para alcenos dissustituídos. **Química Nova**, v. 26, n. 6, p. 948-951, 2003.
- DEBUS, A. G. A longa revolução química. **Ciência Hoje**, vol. 13, n. 77, out./nov., p. 34-43, 1991.
- DEMING, H. G. **General chemistry**: an elementary survey. 4th. ed. New York: John Wiley e Sons, 1939. 769 p.
- DIRAC, P. Quantum mechanics of many-electron systems. **Proceedings of the Royal Society**, A338, p. 714-733, 1929.
- DUTRA, L. H. A. O realismo científico de Claude Bernard. **Cadernos de História e Filosofia da Ciência**, Campinas, série 3, v. 6, n. 1, p. 29-44, 1996.
- EDMISTON, C. The nature of chemical bond – Once more. **Journal of Chemical Education**, letters, v. 69, n. 7, p. 600, 1992.
- ERDURAN, S. Philosophy of Chemistry: an emerging field with implications for education chemistry. **Science & Education**, v. 10, n. 6, p. 581-593, 2001.
- FRANCA, L. **Apontamentos de chimica geral**. 5. ed. Rio de Janeiro: Pimenta de Mello, 1931.
- GOIS, J.; GIORDAN, M. Semiótica na química: a teoria dos signos de Peirce para compreender a representação. **Química Nova na Escola**, n. 7, p. 34-42, 2007.
- GROSHOLZ, E. R.; HOFFMANN, R. How symbolic and iconic language bridge the two worlds of the chemist. In: BHUSHAN, N.; ROSENFELD, S. (eds.). **Of minds and molecules**. New York: Oxford University Press, p. 230-247, 2000.
- GROSS, L.; MOLL, N.; MOHN, F.; CURIONI, A.; MEYER, G.; HANKE, F.; PERSSON, M. High-Resolution molecular orbital imaging using a *p*-wave STM tip. **Physical Review Letters**, v. 107, n. 8, p. 086101, 2011.
- HARDWICK, E. R. **Química**. São Paulo: Edgard Blücher, 1965. 337 p.
- HOLMES, H. N. **Introductory college chemistry**. 4th. ed. New York: The Macmillan Company, 1946. 590p.
- HUMPHREYS, C. J. Electrons seen in orbit. **Nature**, v. 401, n. 6748, p. 21-22, 1999.
- ITATANI, J.; LEVESQUE, J.; ZEIDLER, D.; NIKURA, H.; PÉPIN, H.; KIEFFER, J. C.; CORKUM, P. B.; VILLENEUVE, D. M. Tomographic imaging of molecular orbitals. **Nature**, v. 432, n. 7019, p. 867-971, 2004.
- JENKINS, Z. Do you need to believe in orbitals to use them? Realism and the autonomy of chemistry. **Philosophy of Science**, v. 70, n. 5, p. 1052-1062, Supplement: Proceedings of the 2002 Biennial Meetings of the Philosophy of Science Association. Part I: Contributed papers, 2003.
- KOTZ, J. C.; TREICHEL Jr., P. **Química e Reações Químicas**. 2v. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1998. 730 p.
- KUHN, T. S. **A estrutura das revoluções científicas**. São Paulo: Perspectiva, 2009. 260 p.
- LABARCA, M. G. La filosofía de la química y su impacto en la educación en química. **Educación en la Química**, v. 12, n. 2, p. 59-71, 2006.

_____. Filosofia de la química: a pouco más de diez años de su nacimiento. In: MARTINS, R. A.; LEWOWICZ, L.; FERREIRA, J. M. H.; SILVIA, C. C.; MARTINS, L. A. P. (eds.). **Filosofia e história da ciência no cone sul. Seleção de trabalhos do 6º Encontro**. Campinas: Associação de Filosofia e História da Ciência do Cone Sul (AFHIC), 2010. p. 414-422.

LABARCA, M. G.; LOMBARDI, O. Why orbitals do not exist? **Foundations of Chemistry**, v. 12, n. 2, p. 149-157, 2010.

LAMIRAND, J.; BRUNOLD, Ch. **Cours de chimie**. Paris: Masson et Cie, 1927. 574 p.

LEMES, A. F. G. **Aspectos filosóficos e educacionais da química**: investigando as concepções de doutorandos em química. 2013. 179 f. Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências, São Paulo, 2013.

LEMES, A. F. G.; SOUZA, K. A. F. D.; CARDOSO, A. A. Representações para o processo de dissolução em livros didáticos de química: o caso do PNLEM. **Química Nova na Escola**, v. 32, n. 3, p. 184-190, 2010.

LEUTWYLER, K. Observing orbitals. **Scientific American**, 20 set. 1999. Disponível em <<http://www.scientificamerican.com/article.cfm?id=observing--orbitals>>. Acesso em: 21 jul. 2011.

LOMBARDI, O.; LABARCA, M. The ontological autonomy of the chemical world. **Foundations of Chemistry**, n. 7, p. 125-148, 2005.

_____. The philosophy of chemistry as a new resource for chemical education. **Journal of Chemical Education**, v. 84, n. 1, p. 187-192, 2007.

LOPES, A. R. C. A concepção de fenômeno no Ensino de Química brasileiro através dos livros didáticos. **Química Nova**, v. 17, n. 4, p. 338-34, 1994.

LOWE, J. P.; PETERSON, K. A. **Quantum Chemistry**. 3rd ed. Burlington-San Diego-London: Academic Press, 2005. 703 p.

MACIEL, M. **Elementos de chimica geral**. 2. ed. Rio de Janeiro: Francisco Alves, 1913.

MAHAN, B. H. **Química**: um curso universitário. São Paulo: Edgard Blucher, 1970. 654 p.

MANAFU, A. Internal realism and the problem of ontological autonomy: a critical note on Lombardi and Labarca. **Foundations of Chemistry**, v. 15, n. 2, p. 225-228, 2013.

MARTORANO, S. A. S.; MARCONDES, M. E R. As concepções de ciência dos livros didáticos de química, dirigidos ao Ensino Médio, no tratamento da cinética química no período de 1929 a 2004. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 14, n. 3, p. 341-355, 2009.

MASTERTON, W. L.; SLOWINSKI, E. J. **Química Geral superior**. 4. ed. Rio de Janeiro: Interamericana, 1978. 583 p.

McPHERSON, W.; HENDERSON, W. E. **An elementary study of chemistry**. 2th. ed. revised. Boston: The Atheneum Press, 1917. 576 p.

MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. **Physical Chemistry**: a molecular approach. California: University Science Books, 1997. 1360 p.

MELROSE, M. P.; SCERRI, E. R. Why the 4s orbital is occupied before the 3d. **Journal of Chemical Education**, v. 73, n. 6, p. 498-503, 1996.

MENDONÇA, R. J.; CAMPOS, A. F.; JÓFILI, Z. M. S. O conceito de óxido-redução nos livros didáticos de química orgânica do Ensino Médio. **Química Nova na Escola**, n. 20, p. 45-48, 2004.

MULDER, P. On the alleged non-existence of orbitals. **Studies in History and the Philosophy of Modern of Physics**, v. 41, n. 2, p. 178-182, 2010.

_____. Are the orbitals observable? **HYLE – International Journal for Philosophy of chemistry**, v. 17, n. 1, p. 24-35, 2011.

MULLIKEN, R. S. Eletronic structures of polyatomic molecules and valence. II. General Considerations. **Physical Review**, v. 41, n. 1, p. 49-71, 1932.

NEEDHAM, P. Ontological reduction: a comment on Lombardi and Labarca. **Foundations of Chemistry**, v. 8, n. 1, p. 73-80, 2006.

NERNST, W. **Traité de chimie générale**. v. 1 e 2. Paris: Librairie Scientifique, 1911. 932 p.

NIJAZ, M.; FERNÁNDEZ, R. Understanding quantum number in general chemistry textbooks. **International Journal of Science Education**, v. 30, n. 7, p. 869-901, 2008.

O'CONNOR, R. **Fundamentos de química**. São Paulo: Harper e Row do Brasil, 1977. 669 p.

OGILVIE, J. F. The Nature of the chemical Bond – 1990: There are no such *things* as orbitals! **Journal of Chemical Education**, v. 67, n. 4, p. 280-289, 1990.

_____. Is a molecular orbital measurable by means of tomographic imaging? **Foundations of Chemistry**, v. 13, n. 2, p. 87-91, 2001.

OHLWEILER, O. A. **Introdução à Química Geral**. Porto Alegre: Globo, 1967. 637 p.

OLIVEIRA, W.; TIEDEMANN, P. W.; CECHINNI, R. G.; OSORIO, V. K. L. Eletrodo de hidrogênio – o que há nos livros didáticos além $E^0 = 0$? **Química Nova**, v. 32, n. 4, p. 1064-1068, 2009.

OSTROVSKY, V. N. Towards of philosophy approximations in the 'Exact Sciences'. **HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry**, v. 11, n. 2, p. 101-126, 2005.

OSTWALD, W. **Compendio de química general**. Barcelona: Manuel Marín, 1924. 733 p.

PASCUAL, J. I.; GÓMEZ-HERRERO, J.; ROGERO, C.; BARÓ, A. M.; SÁNCHEZ-PORTAL, D.; ARTACHO, E.; ORDEJÓN, P.; SOLER, J. M. Seeing molecular orbitals. **Chemical Physics Letters**, v. 321, n. 1-2, p. 78-82, 2000.

PARTINGTON, J. R. **Química general e inorganica**. Madrid: Dossat, 1950. 1120 p.

PAULING, L. **Química Geral**. Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico, 1967. 774 p.

_____. The nature of chemical bond – 1992. **Journal of Chemical Education**, v. 69, n. 6, p. 519-521, 1992.

PLASTINO, C. E. **Realismo e antirrealismo acerca da ciência**: considerações filosóficas sobre o valor cognitivo da ciência. 1995. 118 f. Tese (Doutorado em Filosofia) - Faculdade de Filosofia, Letras e Ciências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1995.

_____. A verdade é objetivo da ciência? **Cadernos de História e Filosofia da Ciência**, Campinas, série 3, v. 7, n. 1, p. 9-21, 1997.

PESSOA JR., O. A representação pictórica de entidades quânticas da química. **Cadernos temáticos de Química Nova na Escola**, n. 7, p. 25-33, 2007.

_____. A classificação das diferentes posições em Filosofia da Ciência. **COGNITIO-ESTUDOS: Revista eletrônica de filosofia**, v. 6, n. 1, p. 54-60, 2009.

PIMENTEL, G. C.; SPRATLEY, R. D. **Química**: um tratamento moderno. 2v. São Paulo: Edgard Blücher, 1974. 777 p.

PUIG, Pe. I. **Curso geral de química**. Porto Alegre: Livraria do Globo, 1932. 514 p.

QUAGLIANO, J. V.; VALLARINO, L. M. **Química**. 3ª ed. Rio de Janeiro: Guanabara, 1979. 855 p.

RUSSELL, J. B. **Química Geral**. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil, 1981. 897 p.

SANTAELLA, L. **O que é Semiótica**. 12. ed. São Paulo: Brasiliense, 1994. 84 p.

_____. **A teoria geral dos signos**: como as linguagens significam as coisas. São Paulo: Cengage Learning, 2008. 153 p.

_____. **Semiótica aplicada**. São Paulo: Cengage Learning, 2010. 186 p.

SANTAELLA, L.; NÖTH, W. **Imagem**: Cognição, Semiótica, mídia. São Paulo: Iluminuras, 2008. 222 p.

SCERRI, E. R. The nature of chemical bond – Once more. **Journal of Chemical Education**, letters, v. 69, n. 7, p. 602, 1992.

_____. On the nature of chemistry. **Revista Educación Química**, v. X, n. 2, p. 74-78, 1999.

_____. Realism, reduction, and the 'intermediate position'. In: BHUSHAN, N. e ROSENFELD, S. (eds.), **Of minds and molecules**: new philosophical perspectives on chemistry. New York: Oxford University Press, 2000a. p. 51-72

_____. Philosophy of chemistry: A new interdisciplinary field? **Journal of Chemical Education**, v. 77, n. 4, p. 522-525 2000b.

_____. Have orbitals really been observed? **Journal of Chemical Education**, v. 77, n. 11, p. 1492-1494, 2000c.

_____. The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues. **Philosophy of Science**, v. 68, n. 3, p. S76-S88. Supplement: Proceedings of the 2000 Biennial Meetings of the Philosophy of Science Association. Part I: Contributed papers, 2001.

SCERRI, E. R.; MCINTYRE, L. The case for the philosophy of chemistry. **Synthese**, v. 111, p. 213-232, 1997.

SCHUMMER, J. Coping with the growth of chemical knowledge: Challenges for chemistry documentation, education, and working chemists. **Revista Educación Química**, v. X, n. 2, p. 92-101, 1999.

_____. The philosophy of chemistry: From infancy toward maturity. In: Baird, D.; Scerri, E.; McIntyre, L. (eds.), **Philosophy of Chemistry**: Synthesis of a New Discipline. Dordrecht: Springer, 2006. p. 19-39.

SCHWARZ, W. H. E. Measuring orbitals: provocation or reality? **Angewandte Chemie International Edition**, v. 45, n. 10, p. 1508-1517, 2006.

SCOTT, J. M. W. The nature of chemical bond – Once more. **Journal of Chemical Education**, letters, v. 69, n. 7, p. 600-602, 1992.

SHAHBAZIAN, S.; ZAHEDI, M. The role of observables and non-observables in chemistry: a critique of chemical language. **Foundations of Chemistry**, v. 8, n.1, p. 37-52, 2006.

SIENKO, M. J.; PLANE, R. A. **Química**. 2. ed. São Paulo: Nacional, 1968. 650 p.

SILVA, M. R. Realismo e antirrealismo na ciência: aspectos introdutórios de uma discussão sobre a natureza das teorias. **Revista Ciência e Educação**, v. 5, n. 1, p. 7-13, 1998.

SIMONS, J. There are no such things as orbitals – Act two! **Journal of Chemical Education**, v. 68, n. 2, p. 131-132, 1991.

SLABAUGH, W. H. PARSONS, T. D. **Química Geral**. Rio de Janeiro: LTC, 1977. 277 p.

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. 189 f. Tese (Doutorado em Química) – Programa de Pós-Graduação em Química. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.

SOUZA, K. A. F. D.; MATE, C. H.; PORTO, P. A. História do uso do livro didático Universitário: o caso do Instituto de Química da USP. **Enseñanza de las Ciencias**, n. extra, p. 1337-1341, 2009.

SOUZA, K. A. F. D.; PORTO, P. A. Elementos da Semiótica peirceana na educação em química: considerações e possibilidades. In: XV Encontro Nacional de Ensino de Química, 2010, Brasília. **Anais do XV Encontro Nacional de Ensino de Química**. Brasília: UNB, 2010. Disponível em: <<http://www.xvенеq2010.unb.br/resumos/R1052-1.pdf>>. Acesso em: 18 mar. 2013.

_____. Estratégias visuais na construção de uma realidade química: análise Semiótica das ilustrações em livros didáticos ao longo do século XX. In: VIII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 2011, Campinas. **Anais eletrônicos VIII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências**. Campinas: UNICAMP, 2011. Disponível em: <<http://adaltech.com.br/testes/abrapec/resumos/R0929-1.pdf>>. Acesso em: 15 out. 2012.

_____. A. Chemistry and chemical education through text and image: Analysis of twentieth century textbooks used in Brazilian context. **Science & Education**, v. 21, n. 5, p. 705-727, 2012.

TEIXEIRA, M. J. **Noções de química geral**. 6. ed. Rio de Janeiro: Francisco Alves, 1904.

TROOST, L. **Compendio de química**. Rio de Janeiro: H. Garnier, 1901.

VANCIK, H. Opus Magnum: an outline for the philosophy of chemistry. **Foundations of Chemistry**, n. 1, p. 241-256, 1999.

VANQUICKENBORNE, L. G.; PIERLOOT, K; DEVOGHEL, D. Transition metals and the Aufbau principle. **Journal of Chemical Education**, v. 71, n. 6, p. 469-471, 1994.

VEMULAPALLI, G. K. Theories of the chemical bond and its true nature. **Foundations of Chemistry**, v. 10, n. 3, p. 167-176. 2008.

VIDAL, P. H. O.; CHELONI, F. O.; PORTO, P. A. O Lavoisier que não está presente nos livros didáticos. **Química Nova na Escola**, n. 26, p. 29-32, 2007.

VIHALEMM, R. The autonomy of chemistry: old and new problems. **Foundations of Chemistry**, Online first, 8 september 2010. Disponível em: <<http://www.springerlink.com/content/836231g680244110/>>. Acesso em: 15 jul. 2011.

WANG, S. G.; SCHWARZ, W. H. E. On closed-shell interactions, polar covalences, d shell holes, and direct images of orbitals: the case of cuprite. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 39, n. 10, p. 1757-1762, 2000.

WARTHA, E. J.; FALJONI-ALÁRIO, A. A contextualização no Ensino de Química através do livro didático. **Química Nova na Escola**, n. 22, p. 42-47, 2005.

WOOLLEY, R. G. Must a molecule have a shape? **Journal of the American Chemical Society**, v. 100, p. 1073-1078, 1978.

ZUO, J. M.; KIM, M.; O'KEEFFE, M.; SPENCE, J. C. H. Direct observation of d-orbital holes and Cu-Cu bonding in Cu₂O. **Nature**, v. 401, n. 6748, p. 49-52, 1999.