

UMA QUESTÃO NÃO CONSENSUAL NO ENSINO DE QUÍMICA – O CASO DOS ORBITAIS

Evandro Fortes Rozentalski
Programa de Pós-Graduação Interunidades em Ensino de Ciências
Universidade de São Paulo – USP (Brasil)
rozentalski@usp.br

Paulo Alves Porto
Grupo de Pesquisa em História da Ciência e Ensino de Química (GHQ) – Instituto de Química
Universidade de São Paulo – USP (Brasil)
palporto@iq.usp.br

RESUMO: O conceito de orbital é central no ensino de química, para a compreensão das teorias quânticas sobre a ligação química, a saber, a Teoria de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria de Orbitais Moleculares (TOM). Em vista disso, faz-se necessária uma discussão ontológica e epistemológica do referido conceito com o intuito de compreendê-lo em profundidade. Para tanto, levantamos trabalhos na literatura da Filosofia da Química que discutem aspectos como a existência ou não dos orbitais, e a possibilidade ou não de observá-los. Esses trabalhos proporcionam diferentes perspectivas em relação a esse conceito, e compreendem os debates entre realistas científicos de um lado, e antirrealistas científicos, do outro. Tais debates são considerados não consensuais, e têm sido incentivados com o objetivo de apresentar uma imagem mais fiel da ciência.

PALAVRAS-CHAVE: orbital; realismo científico; filosofia da química.

OBJETIVOS

Este trabalho visa abordar uma controvérsia científica contemporânea, discutida pela literatura em filosofia da química, a saber, a existência ou não de orbitais, com o intuito de subsidiar uma discussão mais rica sobre a natureza desse conceito no ensino de química. Tal discussão levanta questões ontológicas e epistemológicas sobre a natureza da física quântica e, especialmente, da química, possibilitando uma compreensão mais aprofundada sobre a natureza dessa ciência. Além disso, temos como objetivo levar às salas de aulas de ciências de nível superior um tópico não consensual pela comunidade de historiadores, filósofos e sociólogos da ciência, particularmente os debates entre realistas científicos, de um lado, e antirrealistas científicos, do outro. Através de diferentes perspectivas sobre esse debate, professores e estudantes de ciências poderiam construir suas posturas filosóficas de um modo crítico e consciente, através da identificação das virtudes e deficiências de cada postura.

MARCO TEÓRICO

A importância em se levar discussões sobre a natureza da ciência (*Nature of Science* – NOS) para o ensino de ciências tem sido defendida não somente pelos pesquisadores dessa área, mas, também, por historiadores, filósofos, sociólogos da ciência, e contemplada por documentos oficiais de diversos países, incluindo o Brasil.

As discussões sobre a natureza da ciência visam levar para o ensino de ciências aspectos éticos, sociais, históricos e filosóficos relacionadas à ciência, de modo a contemplar o ensino *sobre* a ciência (Matthews, 1992). Contudo, como ressaltou Lederman (2007), não há consenso entre historiadores, sociólogos e filósofos da ciência sobre uma *única natureza da ciência*. Apesar dessa constatação, esse autor destaca que tais divergências seriam irrelevantes para o ensino de ciências. Posto isso, muitos pesquisadores, incluindo o próprio Lederman, têm defendido uma visão consensual sobre a natureza da ciência para ser discutida nas salas de aula. A visão consensual se caracteriza por selecionar e discutir aspectos considerados não controversos da natureza da ciência.

Recentemente, Matthews (2012), seguindo outros autores, levantou críticas, dirigidas particularmente ao grupo de Lederman, à visão consensual da natureza da ciência. Matthews argumenta que, muitas vezes, no ensino de ciências, os tópicos considerados como consensuais são apresentados, embora não seja o desejo de seus criadores, como listas a serem memorizadas por parte dos alunos e mesmo dos professores, em vez de serem utilizadas para subsidiar a construção das suas próprias visões sobre a natureza da ciência.

Ainda nesse trabalho, Matthews (2012) questiona um dos tópicos apresentados como consensuais pelo grupo de Lederman: o de que a ciência apresenta uma base empírica (Lederman, 2002) e, particularmente, a afirmação da “existência de uma realidade objetiva” (Lederman, 2004, p. 303, apud Matthews, 2012). Matthews esclarece que, apesar de não haver discordâncias sérias sobre a realidade do mundo, há um longo e intenso debate entre filósofos sobre a realidade das entidades explicativas empregadas pela ciência. Isso inclui o debate entre realistas, de um lado, e empiristas, construtivistas e instrumentalistas, de outro. Neste trabalho, denominaremos tais debates, genericamente, como *debates realismo x antirrealismo científicos*.

Tendo isso em vista, não rejeitamos as contribuições que tais listas de tópicos propostos como consensuais trouxeram para o ensino de ciências. Mas, considerando a possibilidade de serem tomadas e ensinadas de modo dogmático, existe o risco de deixar de problematizar as diversas ciências e compreendê-las em profundidade, não levando em conta as particularidades de cada ciência. Irzik e Nola (2011) argumentam que as listas de tópicos da natureza da ciência sugerem que essas possam ser aplicadas a qualquer ciência. Contudo, esses autores esclarecem que, quando selecionamos um dos tópicos para exame, certas ciências se aproximam do que se descreve no tópico, enquanto outras, não.

Assim, indicamos que o ensino de questões não consensuais sobre a ciência visa proporcionar aos estudantes diferentes perspectivas sobre uma mesma questão, de modo que esse estudante tenha um entendimento mais amplo e profundo, e construa a sua postura filosófica através do exame de uma diversidade de possíveis posturas filosóficas. Assim se evitaria uma visão rígida, não problematizada e não histórica da ciência (Gil-Pérez et al., 2001). Além disso, cada caso explorado dentro de uma questão não consensual permitiria, também, uma visão mais fiel da ciência em estudo.

Neste trabalho, discutimos a seguinte questão não consensual: os debates entre realistas e antirrealistas científicos por meio do caso referente à existência ou não de orbitais, e a possibilidade ou não de observá-los. Ressalta-se que o conceito de orbital é de extrema importância para a química e, especialmente, para o ensino de química, considerando seu emprego na descrição da estrutura da matéria e, principalmente, nas teorias mecânico-quânticas da ligação química, a saber, a Teoria de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria de Orbitais Moleculares (TOM).

METODOLOGIA

Visando abordar os debates *realismo x antirrealismo científicos* no ensino de química, levantamos, na literatura da área de filosofia da química, trabalhos que discutem a questão da existência ou não dos orbitais (questão ontológica), bem como a possibilidade ou não de observá-los (questão epistemológica). Seleccionamos os trabalhos que foram publicados como resposta à observação de orbitais, anunciada pela revista *Nature* em 1999 (Zuo et al., 1999) e corroborada sem ressalvas pelo editorial da referida revista, a qual descreve que *orbitais foram vistos em órbita* (Humphreys, 1999). Devido ao grande número de trabalhos, e ao espaço reduzido para discuti-los aqui, nos deteremos nos seguintes: Scerri (2001); Jenkins (2003); Pessoa Jr. (2007); e Mulder (2010; 2011). Esses trabalhos foram selecionados pelo fato de exporem diferentes perspectivas em relação a esse caso, de modo a termos uma compreensão mais rica sobre o conceito de orbital e, por consequência, da mecânica quântica. Além disso, uma melhor compreensão da natureza da química e de sua relação com a mecânica quântica também são contempladas.

RESULTADOS

Primeiramente, destacamos que há um entendimento geral entre os autores de que orbital seja a função de onda Ψ de um elétron. Para ilustrar isso, citamos Jenkins (2003): orbital é “uma função de onda que descreve o estado de um único elétron em um átomo ou molécula em termos das coordenadas espaciais do elétron” (apud Levine, 2000, p. 134). Esta compreensão é proveniente dos cânones da mecânica quântica.

Apesar de tal consenso, divergências surgem entre os autores quanto à questão de se a função de onda se refere a algo existente na Natureza, e mesmo se tal questão é pertinente. Um primeiro ponto se refere a se orbitais são entidades ou estados. De um lado, Scerri (2001) e Jenkins (2003) concebem o orbital como uma entidade, enquanto Mulder (2011) o concebe como um estado do elétron. Nos trabalhos dos dois primeiros autores, não há uma problematização do que seja uma entidade. Apesar disso, Scerri (2001) faz uso desse termo: em sua crítica à alegação de que orbitais foram observados, Scerri argumenta que, em espécies polieletrônicas, o orbital não faz referência a uma *entidade* existente na Natureza.

Em oposição à concepção anterior, Mulder (2011) aponta categoricamente que “orbitais são estados, não entidades” (Mulder, 2011, p. 29), ou seja, orbitais seriam condições do sistema em certo tempo. Para Mulder, entidades, tais como as células, levantam questões quanto ao existir ou não, ou, ainda, se essas se referem ou não a algo presente na Natureza. Assim, afirmar a existência ou não da função de onda é 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).

Um segundo ponto desse debate se refere ao valor epistêmico de aproximações e sua relação com a observabilidade de orbitais. Segundo Scerri (2001), a função de onda Ψ somente possui uma solução exata para espécies (átomos, íons ou moléculas) monoelétrônicas. Em espécies polieletrônicas, o modelo orbital seria 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). Nesta situação, nos termos de Scerri (2001), não só poderíamos falar que tal descrição se refere a uma entidade existente na Natureza, mas que, além disso, poderíamos observá-la.

Mulder (2011), por outro lado, argumenta que a observabilidade de orbitais polieletrônicos, e mesmo dos monoelétrônicos, em átomos ou moléculas, dependerá do valor determinado para o estado, isto é, se esse é 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 entre uma melhor ou pior aproximação é dependente do âmbito empírico. A descrição aproximada em espécies polieletrônicas não inviabilizaria a observação de orbitais.

De modo semelhante a Mulder (2011), Jenkins (2003) expõe que rejeitar os orbitais para aplicações particulares não ocorre por consequência de 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, considera 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 aproximativa de tais diagramas de níveis de energia não seria um obstáculo para a sua utilização. Enquanto que no primeiro caso, orbitais seriam rejeitados em aplicações que necessitam de extrema precisão, no segundo, esses seriam aceitos e legítimos, visto o contexto em que são aplicados. Portanto, para esse autor, rejeitar a existência dos orbitais se ampara no âmbito empírico, não em posições metafísicas.

Em relação à última indicação de Jenkins (2003), Pessoa Jr. (2007) considera legítima a escolha de uma posição metafísica, pois defende que podemos interpretar a mecânica quântica de diferentes maneiras, desde uma interpretação positivista, em que orbitais são considerados apenas como construtos matemáticos, sem qualquer relação com a realidade, até interpretações realistas da mecânica quântica, em que orbitais se referem a uma entidade existente no mundo.

CONCLUSÃO

Como observamos, ainda que de maneira breve, diferentes perspectivas podem ser tomadas em relação aos orbitais: são entidades ou estados? Existem ou não existem? São observáveis ou inobserváveis? Qual o valor epistêmico das aproximações envolvendo orbitais? Tais questões, de maneira geral, abrangem os debates *realismo x antirrealismo científicos* e, como visto inicialmente, são consideradas não consensuais. Desse modo, este trabalho visa subsidiar essas discussões no ensino de ciências a fim de proporcionar uma imagem mais fiel da ciência.

Além do exposto, a problematização do conceito do orbital, tal como exposto neste trabalho, possibilita uma discussão da própria mecânica quântica. Como destacado por Erduran (2005), as explicações da mecânica quântica são introduzidas em cursos de química de maneira simplificada; assim, não se evidencia a fecundidade de questões que emergem da mecânica quântica, e que têm influência no modo de pensar e, principalmente, no ensinar química.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Erduran, S. (2005) Applying the philosophical concept of reduction to the chemistry of water. *Science & Education*, 14 (2), 161-171.
- Gil-Pérez, D.; Montoro, I. F.; Alís, J. C.; Cachapuz, A.; Praia, J. (2001). Para uma Imagem Não-deformada do Trabalho Científico. *Ciência & Educação*, 7(2), 125-153.
- Humphreys, C. J. (1999). Electrons seen in orbit. *Nature*, 401 (6748), 21-22.
- Irzik, G.; Nola, R. (2011). A family resemblance approach to the nature of science for science education. *Science & Education*, 20(7-8), 591-607.
- Jenkins, Z. (2003). Do you need to believe in orbitals to use them? Realism and the autonomy of chemistry. *Philosophy of Science*, 70(5), 1052-1062.

-
- Lederman, N., Abd-el-Khalick, F., Bell, R. L., & Schwartz, R. S. (2002). Views of nature of science questionnaire: Towards valid and meaningful assessment of learners' conceptions of the nature of science. *Journal of Research in Science Teaching*, 39(6), 497-521.
- Lederman, N. (2007). Nature of science: past, present, and future. In S. Abell & N Lederman (Eds), *Handbook of research on science education* (pp. 831-880). Mahwah, New Jersey: Lawrence Erlbaum Associates.
- Matthews, M. R. (1992). History, Philosophy and Science Teaching: The Present Rapprochement. *Science & Education*, 1(1), 11-47.
- Matthews, M. R. (2012). Changing The Focus: From the Nature of Science (NOS) to features of Science (FOS). In M. S. Khine (ed.), *Advances in Nature of Science Research* (pp. 3-26). Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer.
- Mulder, P. (2010). On the alleged non-existence of orbital. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 41(2), 178-182.
- Mulder, P. (2011). Are the orbitals observable? *HYLE – International Journal for Philosophy of chemistry*, 17(1), 24-35.
- Pessoa Jr., O. (2007). A representação pictórica de entidades quânticas da química. *Cadernos temáticos de Química Nova na Escola*, 1(7), 25-33.
- Scerri, E. R. (2001). The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues. *Philosophy of Science*, 68(3), S76-S88.
- Zuo, J. M.; Kim, M.; O'Keeffe, M.; Spence, J. C. H. (1999). Direct observation of d-orbital holes and Cu-Cu bonding in Cu₂O. *Nature*, 401(6748), 49-52.