



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENSINO,
FILOSOFIA E HISTÓRIA DAS CIÊNCIAS**

UARISON RODRIGUES BARRETO

**DISCUSSÃO FILOSÓFICA ACERCA DOS MODELOS DE
LIGAÇÃO QUÍMICA**

Salvador

2016

UARISON RODRIGUES BARRETO

**DISCUSSÃO FILOSÓFICA ACERCA DOS MODELOS DE
LIGAÇÃO QUÍMICA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, da Universidade Federal da Bahia e Universidade Estadual de Feira de Santana, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre.

Orientador: Prof. Dr. Nelson Rui Ribas Bejarano.

Salvador

2016

Sistema de Bibliotecas da UFBA

Barreto, Uarison Rodrigues.

Discussão filosófica acerca dos modelos de ligação química / Uarison Rodrigues Barreto. - 2016.

137 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Nelson Rui Ribas Bejarano.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal da Bahia, Instituto de Física. Universidade Estadual de Feira de Santana, 2016.

1. Química - Filosofia. 2. Ligações químicas. 3. Modelos químicos. 4. Teoria (Filosofia).
I. Bejarano, Nelson Rui Ribas. II. Universidade Federal da Bahia. Instituto de Física.
III. Universidade Estadual de Feira de Santana. IV. Título.

CDD - 540.1

CDU - 54:1

UARISON RODRIGUES BARRETO

DISCUSSÃO FILOSÓFICA ACERCA DOS MODELOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA

Dissertação para obtenção do grau de Mestre em Ensino,
Filosofia e História das Ciências.

Aprovada em 15 de fevereiro de 2016.

Nelson Rui Ribas Bejarano - Orientador

Doutor em Educação, pela Universidade de São Paulo
Universidade Federal da Bahia

José Luís de Paula Barros Silva

Doutor em Química, pela Universidade Federal da Bahia
Universidade Federal da Bahia

Marco Antônio Pinto Ribeiro

Doutor em Ciências da Educação, pela Universidade de Lisboa, Portugal
Universidade Estadual do Sudeste da Bahia

Martín Gabriel Labarca

Doutor em Filosofia da Ciência, pela Universidad Nacional de Quilmes, Argentina
Instituto de Estudios sobre la Ciencia y la Tecnología

Suplentes

Osvaldo Frota Pessoa Junior

Doutor em História e Filosofia da Ciência, pela Indiana University, EUA
Universidade de São Paulo

Maria Helena Silveira Bonilla

Doutora em Educação, pela Universidade Federal da Bahia
Universidade Federal da Bahia

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus, que me concedeu forças, saúde e persistência para construir este trabalho. Em seguida, agradeço aos meus pais, Alzira Barreto Rodrigues e Dilcynei Gomes Rodrigues, por tudo, pelo apoio nos momentos de ansiedade, de problemas de saúde e angústia que tive no decorrer deste mestrado. A minhas irmãs e a meu irmão, especialmente minha irmã Dilineia Barreto Rodrigues pelo apoio incondicional durante todos esses anos.

Um agradecimento especial, ao meu professor e orientador, Dr. Nelson Rui Ribas Bejarano, por sua orientação sublime, pessoa pela qual tenho profunda admiração, carinho e respeito. Aquele que sabe o momento certo de orientar, conversar e agir. Pelo conhecimento que tem e acumula, por ter uma humanidade que pouco se vê hoje em dia, só observa mais de perto aqueles que têm o privilégio de conviver com ele. Jamais esquecerei suas palavras: “O caminho está escolhido, basta trilhar por que o sucesso com certeza virá”, elas foram ditas num momento em que mais precisava. Suas palavras tornaram-se um lema e deram-me forças para dar continuidade aos estudos. Estava, nesse momento, iniciando minha trilha neste caminho árduo, complexo e espinhoso. Sou infinitamente grato pela disponibilidade durante todo o desenvolvimento deste trabalho, pela paciência, pelas manifestações de preocupação; mesmo viajando, você esteve sempre muito presente. Foi por você que fiz a Licenciatura em Química, o Mestrado em Ensino, Filosofia e História das Ciências e agora caminhamos com vistas ao doutorado pelo mesmo programa. Obrigado por tudo!

Não poderia deixar de agradecer aos professores Waldomiro Filho, Edilson Moradilo e Martín Labarca, pelo acolhimento desde os primeiros dias de mestrado, ainda como aluno especial: suas disciplinas foram fundamentais para a construção do anteprojeto e do projeto de mestrado.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa de estudo concedida, apoio e auxílio financeiro para que pudesse me dedicar integralmente à pesquisa.

Ao professor Dr. Martín Gabriel Labarca, por participar dessa dissertação e por fazer sugestões e correções valiosas. Suas contribuições perpassam esse trabalho, lançando luzes para uma futura proposta de doutorado.

Ao professor Dr. Marcos Antônio Pinto Ribeiro, por todo apoio, carinho e atenção. Suas contribuições, orientações e sugestões foram fundamentais para a construção deste trabalho, desde a qualificação até o presente momento.

Ao professor Dr. Osvaldo Frota Pessoa Júnior, pelos comentários, contribuições e sugestões relevantes para o desenvolvimento do trabalho.

Aos professores do Programa de Pós-graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, em especial, a Olival Freire, exemplo de simplicidade, conhecimento e humanidade, pelos ricos encontros teóricos e aprendizados.

A Charbel El Hani, pessoa pela qual tenho profunda admiração e respeito, por compartilhar comigo sua visão de mundo, pelas aulas e palestras brilhantes: elas me ajudaram a compreender meu objeto de estudo.

A Jonei Cerqueira Barbosa, pelas diversas contribuições metodológicas: elas foram fundamentais para a construção deste trabalho.

E a José Luís de Paula, por apresentar comentários e sugestões importantes para o aprimoramento da pesquisa.

À professora Maria Conceição Marinho Oki, pelo apoio, carinho e atenção, que desde a Licenciatura em Química me incentivou a estudar.

Aos grupos de pesquisa do CNPQ, Filosofia da Química, Formação de Professores de Química e Ensino de Ciências/Química e Investigação em Química, Filosofia e Currículo, por terem concedido a oportunidade ímpar de aprendizagem e discussão dos trabalhos e por terem me conduzido ao caminho da pesquisa científica.

Aos meus queridos amigos, companheiros e colegas de grupo: Lisandro Bacelar, Jailson Alves, Erivanildo Lopes, Eliana Alcântara, Darcy Ribeiro, Daniel Santana e Tatiana Andrade, pela amizade, pelos dias de convivência, contribuições, força e incentivo. No meu caminho eu encontrei dúvidas, problemas e obstáculos, mas vocês me ajudaram a superar. Obrigado por tudo!

A minha namorada, Claudiane Lima, por todo apoio, carinho e atenção. Você é um presente de Deus em minha vida!

Aos amigos, colegas do programa de Pós-graduação em Ensino, Filosofia e História das Ciências, em especial, a Helaine, Maria, Giovanny Sacco, Letícia,

Moisés, Erika Pérez, Jakeline Enriquez, Omar, Ítalo, Murilena, Patrícia Petitinga, Gabriel Bádue, Lídia e Victória, com os quais a interação me proporcionou encontros, laços afetivos e ricos diálogos.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para a construção deste trabalho.

“O caminho está escolhido, basta trilhar por que o sucesso com certeza virá.”

Nelson Rui Ribas Bejarano

BARRETO, Uarison Rodrigues. **Discussão filosófica acerca dos modelos de ligação química**. 2016. 137 f. Dissertação (Mestrado em Ensino, Filosofia e História das Ciências) – Universidade federal da Bahia; Universidade Estadual de Feira de Santana, Salvador.

RESUMO

Um dos temas mais discutidos no âmbito da Filosofia da Química diz respeito à natureza da explicação química. Nesse sentido, esta pesquisa tem como objetivo caracterizar a forma como modelos explicam a natureza da ligação covalente, especialmente o tratamento que os livros didáticos de Química dão ao tratar das explicações fornecidas pelos modelos de Gilbert Newton Lewis, da Ligação de Valência e do Orbital Molecular. Para tanto, foram selecionados oito livros didáticos de Química de ensino universitário. Trata-se de uma pesquisa exploratória, com abordagem qualitativa, de caráter descritivo, compreensivo e baseada em análise documental. O procedimento metodológico consistiu na leitura dos livros escolhidos dentro do tópico Ligações Químicas, buscando verificar que categorias temáticas eram discutidas dentro das posições teóricas da Filosofia da Química, especificamente: a relação modelo/teoria e explicação química, o problema da explicação estrutural, o problema do reducionismo e o uso da diagramacidade. A análise dos livros permitiu caracterizar quanto ao tema modelo/teoria, o tratamento indiscriminado das perspectivas teóricas, ora denominando-as como modelo, ora como teoria e ora como modelo/teoria. Considerando que os livros são bons indicativos do que ocorre na sala de aula, esse tratamento indiscriminado traz consequências para o processo de ensino-aprendizagem. Nesse sentido, tanto a falta de clareza epistemológica sobre os termos “modelos” e “teorias” veiculados nos livros, quanto o uso indiscriminado das perspectivas teóricas, pode levar professores e estudantes a acreditar que, na ciência, esses conceitos são idênticos, o que é um equívoco. As explicações das perspectivas teóricas pelos livros correspondem ao fato de que se precisamos de explicações químicas, precisamos construir modelos qualitativos. Quanto ao tema “explicação estrutural”, verificou-se que seis livros apontam o problema, porém, o que se observa é apenas uma introdução não problematizadora acerca do tema. Este problema está fortemente vinculado à contraposição da noção de estrutura, com base na teoria quântica em relação à noção clássica. O mesmo ocorre em relação ao reducionismo: apenas três livros apontam o problema. Os diagramas são utilizados com o intuito de comunicar, representar, visualizar, descrever e fundamentar as explicações químicas. Sobre as imagens expressas, elas demandam a mobilização da linguagem simbólica química (diagramática), icônica e estilos de pensamento para além das explicações e representações dos livros didáticos. A noção de modelo é defendida como possibilidade para todas essas perspectivas teóricas que explicam o fenômeno da ligação química.

Palavras-chave: Ligação química. Modelos. Filosofia da química. Teorias.

BARRETO, Uarison Rodrigues. **Philosophical discussion about the chemical bonding models**. 2016. 137 s. Dissertation (Masters in Education, Philosophy and History of Science) - Federal University of Bahia; State University of Feira de Santana, Salvador.

ABSTRACT

One of the most discussed topics within the philosophy of chemistry concerns the nature of the chemical explanation. In this sense, this research aims to characterize how models explain the nature of the covalent bond, especially the treatment that chemistry textbooks give the address of the explanations provided by models of Gilbert Newton Lewis (Lewis), Valence Bond (LV) and Molecular Orbital (OM). Thus, textbooks university teaching chemistry were selected. This is a survey based on a qualitative approach, becoming an exploratory, descriptive study, understanding and shaping up as document analysis. The methodological procedure consisted of the reading of books chosen from the topic chemical bonds in order to verify that the themes discussed within the theoretical positions of the philosophy of chemistry textbooks indicate: relationship model / theory and chemical explanation, the problem of structural explanation, the problem of reductionism and the use of diagramacidade. Analyses of teaching chemistry books allowed the characterization on the subject model / theory, the indiscriminate treatment of theoretical perspectives now terming them as a model, both as theory and now as a model / theory. Whereas books are good indicators of what happens in the classroom, this blanket approach has consequences for the teaching-learning process. In this sense, both the lack of epistemological clarity on the terms of models and theories propagated by books as the indiscriminate use of theoretical perspectives can lead teachers and students to believe in science, these concepts are identical, which is a mistake. The explanations of the theoretical perspectives of books correspond to the fact that: if we need chemical explanations, we need to build qualitative models. On the subject structural explanation, we found that six books point out the problem, however, what is observed is not just a problem-introduction on the subject. This problem is strongly conveyed the opposition of the structure notion based on quantum theory in the classical sense. The same is true of reductionism, only three books point out the problem. Diagrams are used in order to communicate, perform, display, describe and explain the chemical explanations. About the images expressed observed in textbooks, they require the mobilization of the chemical symbolic language (diagrammatic), and iconic styles of thinking beyond the explanations and representations of textbooks. The concept model is advocated as a possibility for all these theoretical perspectives that explain the phenomenon of chemical bonding.

Keywords: Chemical bonding. Models. Philosophy of chemistry. Theories.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Diagrama para molécula de O_2	61
Figura 2	À esquerda, imagem obtida de um microscópio de força atômica e de varredura e a direita a representação da molécula do pentaceno ($C_{22}H_{14}$)	64
Figura 3	(Da esquerda para a direita): representação de Stark, em 1915, do par de elétrons compartilhado na ligação em H_2 , em seguida, a ligação iônica em $NaCl$ e a estrutura rígida de um metal formada por íons positivos e elétrons livres	72
Figura 4	Gilbert Newton Lewis em seu laboratório na universidade da Califórnia, em Berkeley	73
Figura 5	A ideia do “átomo cúbico”. Manuscrito de Lewis de 28 de março de 1902	73
Figura 6	Reprodução da figura dos “átomos cúbicos” de Lewis publicada em 1916	74
Figura 7	Reprodução da estrutura química proposta por Lewis (1916) para o gás Cl_2 . Apenas os elétrons de valência estão sendo mostrados	75
Figura 8	Reprodução da estrutura química proposta por Lewis (1916) para molécula de O_2 . Apenas os elétrons de valência estão sendo mostrados	75
Figura 9	Arranjo dos átomos para a molécula de CCl_4	77
Figura 10	Da esquerda para direita: representação da estrutura de Lewis para a molécula do tetracloreto de carbono CCl_4	77
Figura 11	Variação da energia potencial durante a formação da ligação $H - H$ a partir de átomos de hidrogênio isolados	82
Figura 12	Linus Carl Pauling (1901-1994)	83
Figura 13	Configuração eletrônica do carbono no estado fundamental	84
Figura 14	Hibridização dos orbitais do carbono no metano	85
Figura 15	Orbitais híbridos sp^3 . Os lobos voltados em direção aos vértices de um tetraedro	85
Figura 16	Paramagnetismo do oxigênio	87

Figura 17	Formação de orbitais moleculares, ligante e antiligante por meio da adição e subtração de orbitais atômicos	89
Figura 18	Diagrama de níveis de energia de orbitais moleculares da molécula de H_2	89
Figura 19	Diagrama para a molécula de CO_2	98
Figura 20	Diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares para a molécula He_2	100

LISTA DE QUADROS

Quadro 1	Livros didáticos de química selecionados para a pesquisa	94
Quadro 2	Quadro comparativo quanto ao aspecto de considerar teorias ou modelos às perspectivas teóricas de Lewis, lv e om investigadas nos livros didáticos em geral	110
Quadro 3	Quadro comparativo quanto da abordagem ou não dos problemas da explicação estrutural e do reducionismo nos livros didáticos em gera	110
Quadro 4	Divergências e convergências quanto das posições teóricas dos autores em relação ao tema investigado	117
Quadro 5	Agenda mínima de problemas debatidos pela filosofia da química para o ensino de química	118

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

LEWIS	Gilbert Newton Lewis
HYLE	International Journal for Philosophy of Chemistry
LV	Ligação de Valência
OM	Orbital Molecular
LCAO	Combinação Linear de Orbitais Atômicos
LD1	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 1
LD2	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 2
LD3	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 3
LD4	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 4
LD5	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 5
LD6	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 6
LD7	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 7
LD8	LIVRO DIDÁTICO DE QUÍMICA 8

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	16
1.1 OBJETIVO GERAL	19
1.2 O CAMINHO TRILHADO	20
2 OS MODELOS COM BASE NA FILOSOFIA DA CIÊNCIA	22
2.1 MODELOS: UM TERMO POLISSÊMICO	22
2.2 A CONCEPÇÃO SINTÁTICA	24
2.3 A CONCEPÇÃO SEMÂNTICA	25
2.4 A CONCEPÇÃO MEDIADORA	28
2.5 OS MODELOS PARA OS FILÓSOFOS DA CIÊNCIA	30
2.6 RELAÇÃO MODELO E TEORIA	34
2.7 OS MODELOS E OS REALISMOS NA FILOSOFIA DA CIÊNCIA	38
2.8 SÍNTESE DA SEÇÃO	43
3 OS MODELOS NA FILOSOFIA DA QUÍMICA	44
3.1 A FILOSOFIA DA QUÍMICA E A LINGUAGEM QUÍMICA	45
3.1.1 Modelos, leis, teorias e as explicações em Química	47
3.1.2 O problema da explicação estrutural	54
3.1.3 O problema do reducionismo	56
3.1.4 A importância da diagramacidade química	59
3.1.5 A importância da visualização via modelos	62
3.1.6 Relação modelo, teoria e realidade	64
3.1.7 Síntese da seção	68
4 OS MODELOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA	69
4.1 O CONCEITO DE LIGAÇÃO QUÍMICA	69
4.1.1 O modelo de Lewis para a ligação covalente	72
4.1.2 O modelo da ligação de valência	79
4.1.3 O modelo do orbital molecular	87
4.1.4 Síntese da seção	91
5 ABORDAGEM METODOLÓGICA	92
5.1 O DELINEAMENTO METODOLÓGICO	92
5.2 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS: COLETA DE DADOS	93
6 LIGAÇÃO QUÍMICA NOS LIVROS DIDÁTICOS	95

6.1 LIVRO DIDÁTICO 1.....	95
6.2 LIVRO DIDÁTICO 2	97
6.3 LIVRO DIDÁTICO 3	98
6.4 LIVRO DIDÁTICO 4	100
6.5 LIVRO DIDÁTICO 5	102
6.6 LIVRO DIDÁTICO 6	103
6.7 LIVRO DIDÁTICO 7	106
6.8 LIVRO DIDÁTICO 8	108
6.9 CONSTRUINDO INFERÊNCIAS.....	109
6.9.1 Sobre os livros em geral	109
6.9.2 Implicações para o Ensino de Química	112
7 CONCLUSÃO	120
REFERÊNCIAS	123

1 INTRODUÇÃO

A ligação química é um dos conteúdos centrais do conhecimento químico. Assim, desde as estruturas até as reações químicas, encontra-se presente o papel explicativo da ligação química. Ainda que tal conceito exerça um papel central nas previsões e explicações químicas, não é uma noção simples de definir (WEISBERG, 2008). Nesse sentido, são encontrados diversos enfoques teóricos, desde a noção clássica de Gilbert Newton Lewis, a qual sugere que o par de elétrons é fundamental para ligar dois átomos, formando uma ligação covalente, até as divergentes concepções da Mecânica Quântica.

A capacidade explicativa da Química aumentou com o surgimento da Física Quântica na década de 1920, quando foram realizadas as primeiras aplicações a sistemas químicos. Nesse intuito, desenvolveu-se a Química Quântica, uma nova disciplina que busca explicar e descrever átomos e moléculas, apoiada na formulação de um novo arcabouço teórico para descrever a física dos átomos, a denominada Mecânica Quântica. Com o estabelecimento das próprias características do seu formalismo matemático, duas formulações iniciais foram desenvolvidas para descrever a ligação química: os Modelos da Ligação de Valência (LV) e do Orbital Molecular (OM).

Apesar das diferenças entre os dois modelos quânticos, ambos constituem mais do que dois métodos aproximados para resolver a equação de Schrödinger para um sistema molecular: são descrições distintas de um sistema molecular dentro do formalismo matemático - duas formas incompatíveis de conceber uma molécula. Esses modelos representam funções de onda dos elétrons como aproximações de maneiras distintas. Acreditamos que os usos de aproximações sugerem condições possíveis para se chegar às explicações, de maneira que certos aspectos do mundo possam ser investigados e compreendidos por meio delas. As profundas diferenças conceituais entre LV e OM são discutidas não apenas no âmbito da estrutura do problema quântico, mas no da explicação química da ligação.

A natureza da ligação química começa a ser discutida na Filosofia contemporânea da Química (HENDRY, 2006, 2008; WEISBERG, 2006, 2008; BERSON, 2008; VEMULAPALLI, 2008). Nessa perspectiva, esses autores discutem diversas características da teoria e da metodologia utilizada em Química, além de colocar em discussão o modo como o conhecimento químico é construído. De

acordo com Berson (2008) e Vemulapalli (2008), os químicos escolhem as teorias mais convenientes para cada situação. Berson (2008) examina casos históricos (princípio da exclusão de Pauli, teoria quântica de Bohr, entre outros). Segundo esse autor, as teorias, não apenas em Química, necessitam de muitas correções empíricas *ad hoc* (como exemplo a hipótese de Kekulé). Vemulapalli (2008) examina o uso e a importância proposta pelos químicos, o modelo de ligação de valência e o modelo de orbitais moleculares. Para Ball (2011), os diferentes modelos coexistem em livros didáticos e na própria prática científica, resultando em sobreposição de conceitos com os quais os alunos facilmente se confundem, conforme aponta Hurst (2002). A relação entre os modelos mecânico-quânticos da ligação química tem ocupado grande parte da Filosofia da Química nos últimos anos (LABARCA, 2006).

A importância da ligação química no Ensino de Química tem sido reconhecida. Em razão disso, grande parte dos temas de ensino universitário e ensino médio estão relacionados a esse conceito. Entretanto, é um dos temas que apresentam dificuldades para os estudantes, conforme apontam Fernandez e Marcondes (2006). Segundo esses autores, os estudantes confundem, por exemplo, o arranjo dos pares de elétrons e a geometria das moléculas. Assim, afirmam que a geometria das moléculas é devida apenas “[...] a uma repulsão igualitária entre as ligações e a polaridade da ligação determina a geometria da molécula” (PETERSON et al., 1989; PETERSON; TREAGUST, 1989) e que a “[...] geometria da molécula é devida somente à repulsão entre os pares de elétrons ligantes” (BIRK; KURTZ, 1999).

Além das dificuldades relacionadas aos estudantes, Erduran e colaboradores (2007) e Gilbert (1997) comentam que os próprios professores podem cometer equívocos quanto aos aspectos da natureza da ciência que eles estão ensinando em sala de aula. Por exemplo, em termos do papel dos modelos e modelagem, professores concebem modelos científicos em termos mecânicos e acreditam que os modelos são verdadeiras imagens de fenômenos e ideias (GILBERT, 1997) não observáveis. Os autores comentam que os docentes precisam ter uma visão clara e abrangente acerca da natureza epistemológica do termo modelos. Além disso, destacam que professores precisam entender como tais modelos dizem respeito a características macroscópicas e microscópicas de substâncias, bem como a forma como os dois se relacionam entre si. Para Justi e Gilbert (2002), os professores não enfatizam sobre a necessidade de considerar os

alcances e limitações de modelos durante o processo de modelagem, ou a importância de discutir, com os alunos, essas questões quando apresentam um modelo característico. Tais evidências sugerem a existência de uma lacuna entre estudantes e seus professores no que diz respeito à compreensão desses conceitos por parte dos estudantes.

Uma área potencial de pesquisa para educadores químicos é a investigação de livros didáticos sobre a inclusão de perspectivas filosóficas, sobretudo, vinculada a um conjunto de critérios informados por discussões atuais sobre Filosofia da Química (KAYA; ERDURAN, 2013). Os trabalhos desses autores, assim como os de Adúriz-Bravo e Erduran (2003), Labarca e Lombardi (2007) e Ribeiro (2014) investigam como o campo disciplinar da Filosofia da Química pode contribuir para a formação de professores de Ciências, especialmente quanto à natureza do conhecimento químico.

Desde o início da década de 1990, a Filosofia da Química surgiu como uma subdisciplina da Filosofia da Ciência, examinando a natureza específica do conhecimento químico, tendo como marco de sua institucionalização o ano de 1994 (RIBEIRO, 2014). Algumas implicações desse domínio em educação química têm sido investigadas, embora o território a investigação continue pouco explorado (SCHUMMER, 2006; RIBEIRO, 2014). Acredita-se que os tópicos discutidos e debatidos no campo disciplinar da Filosofia da Química podem ser utilizados na formação de professores, a fim de que os docentes desenvolvam uma concepção epistemológica mais profunda sobre a Química (LABARCA; BEJARANO; EICHER, 2013; RIBEIRO, 2014).

Uma tentativa importante de integração da Filosofia da Química no currículo inicial de professores de Química é defendida por Ribeiro (2014). Apesar de ser um campo amplo, aberto, ainda muito pouco explorado (RIBEIRO, 2014) e de difícil penetração (SCHUMMER, 2006), é possível a aproximação entre Filosofia, Química e Currículo por meio de debate do campo disciplinar da Filosofia da Química (RIBEIRO, 2014; VAN BRAKEL, 1999, 2000).

Vindo da área de Ensino de Química, pretendo, ao longo deste trabalho, discutir e aprofundar em Filosofia da Química, área que tem se consolidado nos últimos anos, dentro da Filosofia da Ciência. Esta consolidação é evidente pela publicação de diversos artigos, livros e textos, sobretudo, pela existência de dois periódicos importantes, a *HYLE (International Journal for Philosophy of Chemistry)*,

que se inicia a partir de 1995, revista vinculada aos filósofos da Química, e a *Foundations of Chemistry*, a partir de 1999, mais vinculada a área de Química.

Apresenta-se, assim, um problema filosófico básico, de natureza epistemológica/ontológica: várias perspectivas teóricas para tratar de um mesmo fenômeno. Entende-se como perspectiva teórica o modo pelo qual se concebem ou se analisam as explicações propostas por Gilbert Newton Lewis (LEWIS), pela Ligação de Valência (LV) e pelo Orbital Molecular (OM) nos livros didáticos de Química.

Então, diante do exposto, como pesquisador, passou-se a refletir sobre o que se aprende no Ensino de Química quando está se discutindo “ligação covalente” e, assim, foram construídas as seguintes questões de pesquisa: As perspectivas de Gilbert Newton Lewis (LEWIS), da Ligação de Valência (LV) e do Orbital Molecular (OM) são modelos ou teorias? Por que três perspectivas distintas concorrem para explicar um mesmo fenômeno?

Essa tensão entre as três perspectivas parece manifestar um problema conceitual profundo sobre a natureza da ligação química, já que elas apresentam diferenças ontológicas e, sobretudo, em relação aos seus aspectos teórico-conceituais. Por tal motivo, acredita-se que o aporte filosófico pode (e deve) proporcionar mais argumentos para abordar o problema.

Diante do problema filosófico, buscou-se estudá-lo utilizando como referencial, as posições teóricas de Agustín Adúriz-Bravo, Margaret Morrison, Mary Morgan e Marcos Antônio Pinto Ribeiro. A ideia aqui foi expor o tema com base em um *corpus* de artigos, textos e livros – um espaço convidativo para o ensino da ciência (ADÚRIZ-BRAVO, 2001).

Acredita-se ser relevante esta análise, considerando ainda haver relativamente poucas pesquisas referentes a livros didáticos de Química destinados ao ensino superior com esse foco, assim como apontam Erduran e colaboradores (2007) e Gilbert (1997). Esta dissertação poderá contribuir para verificar que características têm se desenvolvido na Filosofia da Química, dentro das posições teóricas, que são apropriadas pela Educação Química.

1.1 OBJETIVO GERAL

Caracterizar a forma como modelos explicam a natureza da ligação

covalente, especialmente o tratamento que os livros didáticos de Química dão às explicações fornecidas pelos modelos de Gilbert Newton Lewis (LEWIS), da Ligação de Valência (LV) e do Orbital Molecular (OM).

1.2 O CAMINHO TRILHADO

Este trabalho está organizado em 7 seções, sendo a de n. 1 a introdução. Nela, apresentam-se uma visão geral da proposta desse trabalho, em seguida, o problema, as questões de pesquisa, os referenciais teóricos e o objetivo.

A seção 2, intitulada *Os Modelos na Filosofia da Ciência*, discute a noção de teoria e do uso do termo modelo na Filosofia da Ciência. Busca-se, nesse sentido, por meio de uma discussão teórica, a compreensão da relação estreita entre modelo e teoria, bem como as diferentes visões filosóficas que permeiam essa relação.

A seção 3, *Os Modelos na Filosofia da Química*, busca explorar os autores da Filosofia da Química, com o objetivo de entender a especificidade da linguagem da área, especialmente os modos de explicação química. Para isso, utiliza-se o campo da representação e a linguagem defendidos por Adúriz-Bravo (2001) como um dos seis campos estruturantes necessários para uma Epistemologia da Ciência na formação de professores. Buscou-se identificar, organizar e sistematizar as principais temáticas, tensões e problemas discutidos pela Filosofia da Química.

Na seção 4, *Os Modelos de Ligação Química*, contempla-se uma compreensão teórica baseada em aportes histórico-filosóficos, quanto às formas como os modelos explicam a ligação covalente. Nessa perspectiva, apresentam-se as perspectivas teóricas de LEWIS, LV e OM.

A seção 5, *Abordagem Metodológica*, traz o delineamento metodológico, o plano de análise, o caminho e o método, a modalidade de pesquisa, os procedimentos e a coleta de dados.

A seção 6, *Ligação Química nos Livros Didáticos*, contempla as análises dos livros didáticos, a partir dos dados apresentados. Optou-se por realizar a apresentação dos dados junto com a análise, com base na complexidade da pesquisa qualitativa. Discutem-se os resultados obtidos quanto às categorias temáticas presentes nos livros didáticos, em geral. Em seguida, busca-se discutir

inferências e implicações que são consideradas relevantes para o ensino de Química.

Por fim, a seção 7, *Conclusão*, utiliza a noção de modelo como possibilidade para as perspectivas investigadas. A seguir, apresentam-se as referências.

Espera-se, com este trabalho, contribuir para a reflexão sobre a natureza epistemológica dos termos modelos e teorias no Ensino de Química.

2 OS MODELOS COM BASE NA FILOSOFIA DA CIÊNCIA

Explorar, caracterizar e investigar uma visão de modelos científicos, com base na Filosofia Ciência contemporânea, pode trazer implicações relevantes para o ensino de Química, segundo Adúriz-Bravo (2001). Nesta seção, procura-se entender o estágio atual da discussão da Filosofia da Ciência sobre modelos.

2.1 MODELOS: UM TERMO POLISSÊMICO

O termo *modelos* se constitui, na Filosofia da Ciência, um vocábulo polissêmico (KRAPAS et al., 1997; FRANCOEUR, 2000; ADÚRIZ-BRAVO, 2001; GUTIÉRREZ, 2005; CHAMIZO, 2010; OH; OH, 2011). Segundo esses autores, a polissemia acerca da noção de modelos tornou-se um obstáculo no ensino de Ciências. Adúriz-Bravo (2012) acrescenta que essa polissemia persiste ao longo do tempo, constituindo-se um obstáculo também no campo da Ciência. Nesse sentido, Gutiérrez (2005, p.209) destaca-se que:

Nos artigos se observa um uso plural do termo que nos permite afirmar que o construto, claramente identificado e definido com um termo técnico [...] se está verificando na literatura relativa ao ensino de ciências como um termo genérico, carregado de polissemia, que tem impossibilitado reconhecer o genuíno conceito. A consequência desta diversidade de entendimentos é a impossibilidade da pesquisa educacional, fornecer condições para a construção de conhecimento científico neste campo, e que o fato da polissemia ter impossibilitado a convergência necessária em distintas investigações que permitam comunicação clara, comparação, discussão, evolução de resultados e o consenso entre a comunidade científica. Adverte-se também que a polissemia está atuando como um obstáculo na atividade docente.

A autora argumenta sobre a necessidade de discutir os fundamentos dos modelos científicos, sobretudo, os modelos mentais, o que tem sido feito no ensino de Ciências sem um exame crítico. No entanto, em função do caráter reconhecidamente polissêmico, existem muitas confusões acerca do seu significado (FRANCOEUR, 2000).

O uso de modelos, na prática científica, tornou-se um tema de interesse para a Filosofia da Ciência nas décadas de 1950 e 1960. Porém, sua ideia foi sendo modificada na Filosofia da Ciência, entre 1920 e 1980, conforme segue (ADÚRIZ-BRAVO; ESQUERDA-AYMERICH, 2009):

1 – Inicialmente, o modelo foi um exemplo da teoria, de uma simples interpretação do formalismo abstrato;

2 - Mais tarde, tornou-se um exemplo particularmente digno de imitar a teoria, que orienta a atividade científica;

3 - Finalmente, identificou-se com um exemplo propositado da teoria.

Atualmente, o debate sobre modelos, tem tido uma repercussão relevante na Filosofia da Ciência. Nessa perspectiva, uma quantidade significativa de filósofos reconhece a importância de modelos e está investigando os vários papéis que os modelos desempenham na construção do conhecimento.

Os modelos científicos são um tema de análise filosófica (FISCHER, 2006). Resultado disso pode ser observado com a publicação crescente de artigos sobre o tema, em revistas no domínio da educação científica, como *Ciência e Educação*, *Jornal Internacional de Ciências da Educação*, *Ciência e Educação e Ensino de Ciências* (ADÚRIZ-BRAVO; LORENZANO; ARIZA, 2010). Tomasi (1999), ao tratar do uso do termo modelos em Química Quântica, aponta a necessidade de aclaração semântica. Para esse autor, o significado desse termo em Ciência, é, por definição, incompleto em relação a uma referência empírica que ele chama de "referente". Ainda comenta que, em Química Teórica, o referente é muitas vezes um sistema complexo. Assim, classifica os modelos em materiais e abstratos, sendo que, por sua vez, ambos, podem ser classificados como icônico, analógico e simbólico. Em Química Teórica, o autor acredita que é mais conveniente dividir os modelos em: material, físico, matemático e interpretativo.

Tendo como pressuposto que o ensino de Química é relevante como uma das formas de entendimento do mundo, a necessidade de se buscar respostas para as questões levantadas neste trabalho convergem para uma melhor compreensão sobre os modelos e seu papel frente às teorias científicas. Contudo, a noção sobre modelos vai depender da corrente filosófica na qual ele está inserido e, sobretudo, o ponto de vista dos referenciais teóricos. Desde então, diversos autores atribuem aos modelos – assim como aos processos de sua elaboração, ou melhor, modelagem e testagem – um papel dominante na atividade científica.

A seguir, discute-se a noção de modelos dentro das concepções sintática, semântica e mediadora das teorias científicas.

2.2 A CONCEPÇÃO SINTÁTICA

Sobre a concepção sintática das teorias científicas, considerada como herdeira do positivismo lógico das décadas de 1920 e 1930, uma teoria científica é compreendida, segundo Brown (1983), como um sistema axiomático interpretado, em que um modelo da teoria é uma interpretação que faz com que os axiomas sejam verdadeiros. Nesse sentido, uma teoria, segundo a concepção clássica (positivista lógica), é considerada, de acordo com Bunge (1993, p. 225), como:

Um conjunto de preposições [...] ordenadas pela relação de dedutibilidade [...] um sistema hipotético-dedutivo no sentido de que é expressa de tal maneira que toda fórmula que tem o sistema constitui uma premissa inicial (hipóteses, axiomas e dados) ou uma sequência lógica de um conjunto inicial de suposições.

Essa concepção se refere a um conjunto de enunciados que podem ser deduzidos uns dos outros pela lógica. Dessa forma, as teorias devem ser axiomatizadas, escritas em uma linguagem completamente lógica e todos os seus enunciados devem ser deduzidos uns dos outros. Assim:

Para os propósitos da análise, será útil distinguir três componentes em uma teoria: (1) um cálculo abstrato que é esqueleto lógico do sistema explicativo, e que “define implicitamente” as noções básicas do sistema; (2) um conjunto de regras, que de fato, atribuem conteúdo empírico ao cálculo abstrato, relacionando-o ao material concreto da observação e experimento; (3) uma interpretação ou modelo para o cálculo abstrato, que confere alguma carne à estrutura do esqueleto, em termos de material conceitual ou visualizável mais ou menos conhecido (NAGEL, 1961, p. 90).

Nagel trata a relação dos modelos com as teorias científicas de duas formas básicas distintas, em comparação com o modo pelo qual esse tema é tratado na abordagem semântica. Em primeiro lugar, conforme se expõe a seguir, Nagel se aproxima de Hesse (1966) ao tratar modelos como analogias entre sistemas diferentes. Ao contrário, há uma tendência de associar os modelos matemáticos à abordagem semântica, embora, como se verá mais adiante, especialmente no caso de Van Fraassen, isso não seja claro e talvez nem seja o caso. Em segundo lugar, Nagel se apropria estritamente do papel heurístico dos modelos como analogias, enquanto os defensores da abordagem semântica estão preocupados, sobretudo,

com o papel formal ou semântico, no sentido estritamente lógico, isto é, com os modelos tomados como formas pelas quais se pode interpretar os axiomas de uma teoria.

2.3 A CONCEPÇÃO SEMÂNTICA

Inicialmente, visando à compreensão adequada do significado de modelo a partir de uma discussão filosófica, verifica-se que alguns filósofos da ciência defendem a abordagem semântica (concepção operacionalista, tanto dos modelos, quanto das leis e teorias científicas). Essa abordagem está mais próxima da forma operacional da qual a autora Cartwright (1999) comenta que, as leis científicas são vistas de maneira operacionalista: como prescrições do comportamento dos cientistas que desejam construir a máquina nomológica – isto geraria as regularidades empíricas que as leis científicas descrevem – descrita no modelo. Por conta disso, o próprio modelo é a explicação que procuramos.

A concepção semântica pode ser denominada também como semanticista, modelística, modelo-teoria, e se baseia em modelos representacionais das teorias científicas. Essa concepção se apresenta como uma resposta interessante para as exigências epistemológicas de uma educação científica de qualidade para todos, sobretudo, para a formação inicial e contínua de professores de ciências (ADÚRIZ-BRAVO; LORENZANO; ARIZA, 2010).

A concepção semântica das teorias científicas surge nos trabalhos de J. C. McKinsey, E. Beth, J. Von Neumann e A. Tarski, desenvolvida na primeira metade do século XX (ADÚRIZ-BRAVO, 2010). No entanto, quem primeiro formalizou essa concepção representacional das teorias foi o epistemólogo Patrick Suppes. Seu trabalho consistia na reconstrução de teorias físicas, utilizando como referenciais os métodos de Tarski e McKinsey.

Há uma série de variantes da concepção semântica. Muitos teóricos, aceitam a concepção de Suppe (1974), em que teorias são entidades extralinguísticas que podem ser descritas por suas formulações linguísticas. Essa ideia sugere que a concepção semântica da teoria como modelo é útil para análise da estrutura das teorias científicas. Segundo o autor, o ganho na verdade descritiva

permite apontar que, quando obtém uma teoria científica, é possível especificar um modelo.

A principal ideia introduzida pela concepção semântica é um movimento a partir de uma caracterização linguística (apoiado pelo empirismo lógico) para a caracterização das teorias de representação da ciência natural. De acordo com Van Fraassen (2007, p.122), esta concepção considera que:

Apresentar uma teoria é especificar uma família de estruturas, seus modelos; e, em segundo lugar, especificar certas partes desses modelos (as subestruturas empíricas) como candidatas à representação direta dos fenômenos observáveis. As estruturas que podem ser descritas em relatos experimentais e de medição podemos chamar de aparências; a teoria é empiricamente adequada se possui algum modelo tal que todas as aparências sejam isomórficas a subestruturas empíricas daquele modelo.

Conforme apresenta Van Fraassen (1989), uma teoria é constituída por uma família de modelos. Para esse autor, essa família pode ser descrita de diversas maneiras, utilizando distintas instruções em distintos idiomas, sendo que nenhuma formulação linguística tem estatuto privilegiado.

Rumo à nova epistemologia semanticista se pode incluir também, entre outros autores, Van Fraassen, F. Suppe, Ronald Giere, M. Dalla Chiara, G. Toraldo di Francia, Mary Hesse, M. Przelecki, R. Wójcicki, G. Ludwig, N. Da Costa, J. Sneed, W. Stegmüller, C.U Moulines e W. Balzer, Patrick Suppes, Joseph Sneed, Diederic, Guerrero Pino e Lorenzano (ADÚRIZ-BRAVO; LORENZANO; ARIZA, 2010). Para os semanticistas, a caracterização mais adequada de teoria é aquela que considera a identificação de uma classe de estruturas (seus modelos), ou seja, uma teoria não deve ser representada somente com base em axiomas (leis) que a constitui, mas também por um conjunto de modelos que a contêm. Para Adúriz-Bravo, Lorenzano e Ariza (2010, p. 63), seus membros compartilham da posição: “A importância de uma teoria não é a maneira em que se diz que é a realidade, mas o que a teoria ‘representa’ (representação modelística) sobre esses pedaços de realidade a partir da qual deseja perceber.”

Ademais, Lorenzano (2003) caracteriza a família semanticista mediante três pilares básicos:

1 - O componente básico para a identidade de uma teoria é uma classe de estruturas, especificamente, uma classe de modelos. Uma teoria se caracteriza,

assim, em primeiro lugar, por determinar um conjunto de modelos; apresentar/identificar uma teoria é apresentar/identificar a família de seus modelos característicos. A determinação dos modelos se realiza mediante uma série de princípios ou leis. As leis devem ser entendidas, portanto, como a definição de uma classe de modelos. O fato de leis definirem os modelos não significa, obviamente, que uma teoria é uma definição, ou é verdadeira, por definição ou coisa parecida. O fato de leis definirem uma série de modelos significa apenas que as leis determinam que as entidades se comportem de acordo com a teoria; por exemplo, alguma entidade, um "pedaço do mundo", é "por definição" um sistema (modelo) teoria se e somente se ele satisfizer os tais princípios.

2 - Uma teoria não apenas determina, por meio de suas leis ou outros mecanismos, uma classe de modelos. A identificação da teoria consiste na identificação intencional dos fenômenos empíricos que se pretende explicar.

3 - A teoria define os modelos com o objetivo de representar adequadamente os fenômenos; em termos tradicionais, tais fenômenos concretos satisfazem as leis das teorias, que se comportam segundo o que dizem as leis. Esse objetivo é explicitado por um ato linguístico ou proposicional, mediante uma afirmação: a asserção empírica afirma que, entre os sistemas empíricos que queremos contar e os modelos determinados pelas leis, existe certa relação. A afirmação é que a nossa teoria representa adequadamente a "realidade", isto é, que os nossos modelos são "bem aplicados" aos sistemas que vão explicar.

No entanto, a existência de várias abordagens na família semantista tem a ver com as maneiras como seus membros conceituam ou operacionalizam esses três pilares básicos. Vale destacar que vários membros da família semântica, não compartilham uma série de teses filosóficas substantivas e, sim, uma forma e um quadro em que desejam propor problemas filosóficos (DIEZ; LORENZANO, 2002). Para fins de ensino, há pelo menos, quatro aspectos em que as propostas de Suppe, Van Fraassen e Giere, as teorias estruturalistas podem ser diferentes: (a) A maneira em que a noção de "modelo" é caracterizada; (b) O modo pelo qual a classe captura esses modelos; (c) A forma como os modelos estão relacionados com "sistemas empíricos" ou "pedaços de realidade"; (d) A forma como esses sistemas são caracterizados empiricamente (ADÚRIZ-BRAVO; LORENZANO; ARIZA, 2010).

Do nosso ponto de vista, a concepção semântica das teorias científicas é coerente para o Ensino de Ciências, em parte por que a provê de fundamentos

epistemológicos mais coerentes com as finalidades atuais da alfabetização científica. No entanto, existem pelo menos sete dificuldades dentre as principais que ligam o semanticismo ao ensino das Ciências Naturais: (a) pouca formação epistemológica; (b) formação ingênua da epistemologia contemporânea; (c) curta distância histórica; (d) complexidade e multiplicidade de conteúdos; (e) dificuldades dos formalismos; (f) ausência de um guia para análises (ADÚRIZ-BRAVO; LORENZANO; ARIZA, 2010).

Conforme discutido anteriormente, a concepção semântica consiste em considerar as teorias como famílias de modelos, e não mais como conjuntos de axiomas escritos em uma linguagem formalizada, conforme a abordagem sintática. Retomando a abordagem semântica, as teorias são, portanto, entidades extralinguísticas (famílias de modelos e não conjunto de proposições). Os modelos é que ocupam o lugar central (VAN FRAASSEN, 1980). Segundo Suppe (1989), as teorias científicas devem ser interpretadas como estruturas abstratas que são, segundo o autor, “modelos matemáticos”. Admite-se que essa tipologia de modelos deva ser desenvolvida para a prática científica. Assim, por exemplo, em uma situação real e conhecida, o modelo auxilia na elaboração de leis que ali se aplicam. Para os defensores da abordagem semântica, as teorias são estruturas abstratas representadas por axiomas, ou leis, ou relatos e descrições de menor grau de generalidade.

2.4 A CONCEPÇÃO MEDIADORA

O epistemólogo estadunidense Ronald Giere foi quem forneceu as bases conceituais para introdução da ideia de “modelo como um mediador”: modelo de um sistema real de uma teoria (LOMBARDI, 1998, 2010; MORGAN; MORRISON, 1999; ADÚRIZ-BRAVO; LABARCA; LOMBARDI, 2014). Esta noção, parte da seguinte relação:

Teoria ↔ Modelo ↔ Realidade

Para Giere (1992, 1999), a relação entre o modelo e a realidade é de similaridade; o modelo, não é real, porém, possui valor de semelhança ao sistema real em alguns aspectos e graus. Por exemplo, no contexto da Mecânica Clássica,

Lombardi (2010) comenta que o modelo pode ser construído a partir de um gás real como uma quantidade determinada de pequenas esferas sólidas que interagem entre si, de acordo com a lei de choque elástica. Vale destacar que o sistema de relacionamento aqui não se refere apenas a uma semelhança superficial entre eles (gás real e as esferas sólidas, por exemplo), mas a uma ligação de caráter eminentemente teórico; modelo é o "representante" do sistema físico e não apenas uma mera representação (MORGAN; MORRISON, 1999; GIERE, 1999).

Em outras palavras, a ideia giereana de similaridade propõe operacionalizar a noção de que os modelos são análogos (teóricos) de seus sistemas. Dentro desse contexto, modelos não são o mundo, porém, uma analogia que "se parece" em alguns aspectos (e, contudo, diferente de muitos outros). Essa posição se aproxima de Chamizo (2006), uma vez que considera modelos como sendo distintos da realidade.

Sem dúvida, acreditamos que a concepção de Giere de modelo é poderosa; qualquer representação que nos permita pensar, falar e agir com rigor e profundidade no sistema. cremos que esta posição qualifica um modelo teórico não apenas como modelos altamente abstratos, mas como modelos, imagens, tabelas, analogias, desde aqueles que permitem descrever, explicar, prever e intervir. Dialogando com Giere, Adúriz-Bravo (2010) defende que este "modelo de modelo" parece ser mais frutífero hoje para o ensino de ciências experimentais. Para ele, modelos são ferramentas indispensáveis para a experimentação que poderá testar a teoria e contribuir para sua reelaboração, se for o caso.

"A função principal de modelos como mediadores entre a teoria e a realidade é a de permitir o uso de uma teoria científica para explicar um fenômeno natural através de uma conceituação de tais fenômenos" (ADÚRIZ-BRAVO; LABARCA; LOMBARDI, 2014, p.9). Para Morgan e Morrison (1999) e Morrison (1998, 2005), as principais características do modelo como mediador são: os modelos não são deriváveis a partir da teoria, pelo contrário, a sua formulação é geralmente necessária para a aplicação da teoria como condição de sistema real; os modelos atuam como mediadores na medida em que carregam um conhecimento particular ou local de conhecimento sobre o sistema; os modelos não são deriváveis de dados empíricos, por meio de técnicas estatísticas, mas, por outro lado, geralmente, envolvem modelos conceituais e pressupostos teóricos substanciais; e os modelos possuem a propriedade importante dos sistemas reais de substituir referentes

diretos das teorias. Essas características brindam aos modelos certa autonomia em relação às teorias e à realidade; para Morgan e Morrison (1999), modelos são parcialmente independentes de ambos, teorias e mundo, portanto, autônomos.

Portanto, modelos assumem uma natureza híbrida, não teoria, não real, de maneira que tal autonomia permite que os modelos científicos possam ser utilizados como mediadores entre os dois campos de atuação.

2.5 OS MODELOS PARA OS FILÓSOFOS DA CIÊNCIA

Na literatura epistemológica, Hesse (1966) se baseia nas ideias de Max Black (1962), dentre outros autores. Em seu livro, *Models and metaphors: studies in language and philosophy*, Black (1962) apresenta a tipologia de modelos em escala, analógicos, matemáticos e teóricos. O autor faz distinção entre os modelos em escala e os modelos analógicos. Segundo ele, a principal característica de um modelo em escala é que ele é um objeto material icônico, ou seja, tem uma relação com a realidade que, de certa forma, captura alguma qualidade dessa realidade; contudo, a relação entre o modelo e a realidade é qualitativa. Por outro lado, o modelo analógico, apesar de ser considerado um objeto material e icônico, captura uma rede de relações bastante abstratas, que é a analogia da forma/estrutura.

Black (1962) também discute sobre os modelos matemáticos como objetos abstratos. Segundo ele, os modelos matemáticos não nos dizem como ou por que os sistemas funcionam de tal forma; na verdade, eles apenas dizem como eles se comportam. Por exemplo, tal gráfico mostra o comportamento de uma substância ao ser aquecida em um intervalo de tempo, segundo algumas premissas. Mas se questionarmos: por que é que a substância se comporta assim? Não será no modelo matemático que encontraremos a resposta, mas em uma determinada teoria na qual o modelo está inserido. Nesse caso, precisaríamos estudar o que caracteriza uma substância. A equação $PV = nRT$, é outro exemplo de modelo matemático que nos permite explicar o comportamento dos gases ideais.

Finalmente, o autor discute também sobre modelos teóricos, que são aqueles que os cientistas utilizam na ciência. Para Black, um modelo teórico é abstrato e não precisa ser construído; pelo contrário, apenas descrito pelos cientistas que o utilizam. Hesse (1966), por sua vez, introduz o pensamento de que

as analogias envolvidas nos modelos científicos são de três tipos: analogia positiva, quando há aspectos semelhantes entre as duas coisas (exemplo, moléculas de um gás e bolas de bilhar têm massa); analogia negativa, quando não há semelhanças entre as duas coisas (exemplo, bolas de bilhar são coloridas, as moléculas de gás não o são); e; a analogia neutra, quando os aspectos envolvidos ainda não foram descobertos, mas que poderão ser quando o modelo for estudado.

As discussões de Black e Hesse, portanto, convergem para um mesmo ponto, em que ambos consideram os modelos como entidades de caráter abstrato/analógico. Pode-se afirmar que as abordagens de Nagel (1961) e Hesse (1966) sobre modelos são realizadas de forma semelhante. Verifica-se que Hesse (1966), utiliza o termo “modelo” para dar nome aos sistemas que são apenas “imagináveis” ou que podem ser construídos a partir da mente humana. Entretanto, Hempel (1977) sinaliza os modelos como fundamentais nas ciências, pois desempenham papel essencial no desenvolvimento de novas teorias e na compreensão de novos fenômenos. Assim, modelos como o de Bohr, utilizado para o átomo de hidrogênio, e o modelo da molécula de DNA, são utilizados pelo autor para reforçar sua concepção. Segundo Suppe (1989), os modelos têm o papel de representar tais estados, sendo que a correspondência entre o modelo e o comportamento de um sistema não precisa ser uma correspondência que apresente uma forma idêntica.

Outro importante teórico que discute a noção de modelos é Ronald Giere. Ao discutir as diferenças entre modelos como representações e modelos teóricos, Giere (1999, p.5) alega:

Em meu entendimento pessoal da prática científica, o conceito fundamental é aquele de modelo. Para mim, os modelos na ciência são entidades fundamentalmente representacionais. Sustento que os cientistas utilizam tipicamente os modelos para representar aspectos do mundo. A classe de modelos científicos inclui modelos físicos em escala e representações diagramáticas, mas os modelos que mais interessam são os teóricos. Estes são objetos abstratos, entidades imaginárias cuja estrutura pode ou não ser semelhante a aspectos dos objetos e processos no mundo real. Os próprios cientistas tendem mais a falar do ajuste entre seus modelos e o mundo, uma terminologia que adoto com agrado.

Giere, em outro estudo (2004, p.743), considera que as práticas científicas de representação do mundo são fundamentalmente pragmáticas e, se quisermos

compreender essas práticas, não devemos começar com a linguagem em si, mas com as práticas científicas em que a língua é utilizada. Nessa perspectiva, admite que:

O foco na linguagem como um objeto em si carrega consigo que a suposição de que o nosso foco deve ser a representação, entendida como uma relação de dois lugares entre entidades linguísticas e do mundo.

Para esse autor, cientistas são agentes intencionais, com objetivos e propósitos definidos. Ainda, sugere a seguinte expressão:

S usa X para representar W para fins P

Segundo Giere, S pode ser um cientista, um grupo científico ou uma maior comunidade científica; W é um aspecto do mundo real. Então, de maneira mais informal, a relação a ser investigada tem a forma: cientistas usam X para representar algum aspecto do mundo para fins específicos. Porém, a questão que se coloca dentro desse contexto é: "Quais são os valores da variável, X?" Incidindo sobre a prática científica, verifica-se que X pode ser, por exemplo, palavras, equações, diagramas, gráficos e, cada vez mais, as imagens geradas por computador. Giere, Suppes e Van Fraassen assumem que não há relação direta entre o que dizemos (proposições) e os fenômenos. Esta relação é mediada por modelos entendidos como representações abstratas do mundo. Tais representações não podem ser reduzidas para proposições ou para a realidade.

Em relação aos modelos teóricos, Giere (1992) considera que são entidades abstratas, não necessariamente linguísticas, que se comportam exatamente segundo prescrito por uma série de enunciados ou proposições (em qualquer nível simbólico) pelos quais se define essa entidade. Para esse autor, cada modelo científico é similar ao sistema que modela em alguns aspectos e graus de ajuste. Discutindo a concepção desse autor, o modelo seria uma estrutura cognitiva de algo que lhe confere um papel fundamental na prática científica. Nesse sentido, modelos em ciências são objetos abstratos, construídos em conformidade com princípios gerais adequados e condições específicas. O que é especial sobre os modelos é que eles são projetados de modo que seus elementos possam ser identificados com características do mundo real - isso é o que torna possível a utilização de modelos

para representar aspectos do mundo (GIERE, 1992). Assim, modelos são usados com o propósito geral de aprender o que é algo semelhante.

Outros autores que discutem a noção de modelos científicos são Chamizo (2006) e Oh e Oh (2011). Em seus trabalhos, propõem caracterizações gerais acerca da natureza dos modelos científicos, admitindo “[...] sua importância em praticamente qualquer nível educativo” (CHAMIZO, 2006, p.406). Em seu trabalho, Chamizo aponta oito características “menos controvertidas” de modelos:

1. Os modelos são representações de objetos, sistemas, fenômenos ou processos. Um modelo sempre é modelo de algo. Os modelos enquanto representações simplificam o que representam e pretendem entendê-los.
2. Os modelos são instrumentos para tentar responder as perguntas científicas. Os modelos são usados para obter informações factuais para as quais não temos acesso direto.
3. Os modelos guardam analogias com os fenômenos que os representam. Os modelos são similares com a realidade em certo grau, e nos permite derivar hipóteses passíveis de serem testadas.
4. Os modelos são distintos (e mais simples do que) a realidade, por que respondem a um sentido: para que se propôs, de onde vêm e para onde vão.
5. Os modelos são construídos em um compromisso entre as semelhanças e as diferenças que eles têm com a realidade que os representam. Portanto, os modelos podem ser ampliados e corrigidos.
6. Os modelos são desenvolvidos ao longo da história, em um processo iterativo de revisão para acomodar novas evidências empíricas.
7. Os modelos devem ser aceitos (consensuais) pela comunidade científica. A ciência é um conhecimento público e válido.
8. Modelos podem ser classificados em dois tipos. A classificação em modelos icônicos (imagens e modelos) e conceituais (relacionados com a linguagem, como símbolos e fórmulas) “parece ser mais relevante para se discutir a aprendizagem” (CHAMIZO, 2006, p. 479, tradução nossa).

Convém destacar que a representação atribuída aos modelos é parcial, apresentando limitações: tanto “abstraem a partir de”, quanto “traduzem em outra forma” a natureza do real, sistema ou ideia conforme apontam Morgan e Morrison (1999). De forma similar a Chamizo, Oh e Oh (2011, p. 1120, tradução nossa), buscando um consenso entre os epistemólogos e educadores em ciência, apresentam uma recente revisão de literatura onde apontam “cinco subtópicos relativos à natureza dos modelos e modelagem”:

1. Significados da ideia de modelos. Os autores sinalizam que não há uma única definição de modelo, porém é comum se utilizar o termo “representação” no momento de explicar o que são os modelos.
2. Propósitos da modelização. Usualmente se considera que as principais metas dos modelos são descrever, explicar e prever determinados aspectos do mundo natural.
3. Multiplicidade dos modelos científicos. É possível construir muitos modelos distintos para o mesmo fenômeno. Isso implica que, a comunidade científica pode sustentar diferentes perspectivas e que os modelos somente enfocam determinados aspectos do fenômeno.
4. Mudanças nos modelos científicos. Em cada momento histórico, os modelos são consensuais pela comunidade científica.
5. Usos dos modelos nas aulas de ciências. O uso de modelos científicos por professores no ensino “é justificada na ideia que as representações externas de representações visuais fornecem apoio para construir e racionalizar com representações internas: os modelos mentais”.

Para Schummer (2014, p.8), a construção de modelos consiste em “[...] restringir o âmbito de aplicação de um modelo de acordo com hipóteses e aproximações efetuadas no processo de modelagem bem como descobertas empíricas que mostram os seus limites.”

2.6 RELAÇÃO MODELO E TEORIA

Para entender a relação estreita dos modelos com as teorias, Adúriz-Bravo (2012) sugere a necessidade de recorrer a algumas caracterizações da ideia de modelo científico propostas pela epistemologia do século XX. Nesse sentido, o autor considera três grandes concepções:

1. Para o positivismo lógico e a concepção herdada (1920-1960), um modelo científico é um exemplo qualquer de uma teoria; a teoria se considera a entidade central para as análises epistemológicas.
2. Para a nova filosofia da ciência (1950-1980), o modelo se converteu em um exemplo paradigmático (isto é digno de imitação) de uma teoria.
3. Por último, para a concepção semântica das teorias científicas (1970 até hoje), o modelo está identificado com um exemplo intencionado da teoria (isto é, um exemplo que a teoria está interessada em explicar) (ADÚRIZ-BRAVO, 2011).

De acordo com o autor, a mais influente corrente filosófica, a concepção sintática ou (herdada) das teorias científicas, dos anos de 1950 e 1960, estudou de

forma profunda os aspectos lógicos e linguísticos do conhecimento científico. Para os epistemólogos dessa escola, as teorias empíricas eram baseadas em cálculos axiomáticos “interpretados” (com base na lógica formal). Nesse contexto, um modelo era uma entidade de menor interesse, podendo ser reduzido a um sistema (estrutura) que satisfizesse a todos os axiomas das teorias científicas, convertendo-se em modelo dessa teoria depois desse processo de interpretação (DIEZ; MOULINES, 1999).

Com o surgimento da nova Filosofia da Ciência nos anos de 1960 e 1970, Thomas Kuhn, propôs centrar-se na ideia de modelo, uma vez que ele acreditava ser, central para o entendimento do funcionamento da empresa científica. Na concepção semântica, dos anos de 1970 e 1980, os modelos são o centro de parte explicativa de uma teoria, constituindo-se em um conjunto ou classes de modelos que podem ser caracterizados pelas leis científicas (os axiomas) da teoria científica, conforme apontam Diez e Moulines (1999). Nesse sentido, “[...] os modelos de uma teoria são “projeções” da teoria sobre o mundo, “suas possíveis realizações”; podem ser entendidos como correlatos formais de pedaços de realidade que ela pretende explicar” (ADÚRIZ-BRAVO, 2012, p.7).

Delattre (1992) argumenta que, desde a sua origem, a noção de teoria aplicada à ciência possui duas direções distintas. A primeira refere-se à parte racional, discursiva, demonstrativa, da atividade cognitiva que provêm da lógica. A segunda diz respeito à parte intuitiva da atividade teórica, relacionada ao conhecimento dos princípios sobre os quais se podem fundar as demonstrações lógicas. Nesse sentido, há um forte debate acerca da seguinte questão: Em que medida, uma teoria científica é verdadeira? Essa questão tem duas vertentes. A primeira, uma vertente epistemológica que envolve o alcance e os limites do conhecimento científico, ou seja, em que medida temos razões, ou melhor, boas razões para acreditar na verdade das teorias científicas. Contudo, a questão epistemológica examina argumentos a favor da verdade, parcial e aproximativa das teorias e também da existência de entidades não observadas. A segunda vertente inclui a metafísica, já que questionamos sobre a natureza das realidades das quais postulam as teorias; por exemplo, não basta dizer que o elétron é real, mas temos de explicitar o que entendemos por real, ou seja, uma questão metafísica. Nesse sentido, admitimos que o termo real, tem dois sentidos. O primeiro se refere ao sentido metafísico profundo, que é o mundo das coisas “em si”, que é um mundo

inalcançável. Outro sentido se refere àquilo que se mostra como realidade, ou seja, aquilo que “aparece” para um pesquisador, por exemplo, quando mede, observa, dentre outros.

Outro aspecto discutido na Filosofia a Ciência é apontado por French (2009), ao alegar que as teorias são muitas vezes bastante complexas e difíceis de operar, daí a necessidade do modelo para mediar a relação entre teoria e fenômeno. Assim, o teórico considera modelo como parte constitutiva da teoria. No quadro das atividades científicas, Morgan e Morrison (1999) compreendem teorias como sistematizações explicativas que, por meio de princípios gerais, governam amplos grupos de fenômenos.

Para Adúriz-Bravo (2001), os modelos das ciências atuais, enfatizam o caráter mais representacional (simbólico, analógico e operativo) do conhecimento em ciências, deixando de lado seus aspectos formais, contudo, relativizados. A ideia central dessa visão teórica é admitir os mais variados mecanismos de representação do mundo (SUPPE, 1989; GIERE, 1992; ADÚRIZ-BRAVO, 2012). Assim, tanto as teorias como as representações se comunicam mediante diversas linguagens (gráficas, simbólicas, icônicas, computacional etc.), de maneira que os epistemológicos são capazes de relacionar a natureza da representação científica com outras formas de representações humanas (GIERE, 1992a; IZQUIERDO, 1999a). Ainda, nessa tônica, Van Fraassen (2007, p.178) diz “[...] que uma teoria explica um ou outro fato é afirmar que existe uma relação entre essa teoria e aquele fato, relação que é independente da questão se o mundo real, como um todo se ajusta àquela teoria.”

Em relação ao valor de uma teoria, Sampieri, Collado e Lucio (1996), apresentam cinco critérios: 1) a capacidade de descrição, explicação e predição do fenômeno; 2) consistência lógica (a teoria deve ter proposições que devem ser interrelacionadas); 3) a perspectiva (relacionada com o nível de generalidade, a explicação de fenômenos e suas aplicações); 4) fertilidade lógica; e, por final, 5) a parcimônia (tem a ver com a simplicidade, qualidade desejável de uma teoria). Nesse contexto, os físicos, por exemplo, consideram uma teoria científica satisfatória se concorda com os fatos experimentais, se é logicamente consistente e se é simples, comparada com outras explicações científicas.

Diante do exposto, entende-se que teorias, têm sido compreendidas, nos últimos 50 anos, como sistemas de conhecimento. Ou seja, uma teoria é um sistema

formado por um conjunto de enunciados, leis, pressupostos, postulados, modelos, isto é, todos esses termos fazem parte de uma teoria. Nesse sentido, uma teoria deve ter capacidade de explicação teórica (que é uma característica epistêmica central para a ciência), ou seja, ela deve ser capaz de explicar a maior parte do domínio que tenta investigar; de maneira que não deve apenas descrever, predizer e explicar um caso particular, mas um conjunto de casos. Em outras palavras, teorias científicas devem explicar um conjunto de fenômenos, a partir de casos particulares até alcançar generalizações.

Modelos são estruturas fundamentalmente representacionais, desenvolvidas com descrições aproximadas, mais limitadas, podendo ser alargada para outros casos. Amparados por Giere (1992, 1999, 2004) e Chamizo (2006), argumenta-se neste estudo que modelos são distintos da realidade; nunca são a realidade e nem devem ser, pois um modelo que tenta ser a realidade, não é mais um modelo, mas uma descrição do real. Nessa perspectiva, modelos mostram o que é teoricamente possível e não o que é a realidade. O modelo é, portanto, aproximação de uma representação teórica para um fenômeno. Ainda, consideramos que os modelos omitem muitos detalhes; eles retiram informações do real que são teoricamente relevantes para sua construção, sendo parcialmente independentes de ambos os domínios: teoria e realidade.

Concordamos com as posições teóricas de Batista (1999), Morgan e Morrison (1999) e Rosenberg (2005), acerca das diferenças entre modelos e teorias. Tais distinções para esses autores consistem no nível de abrangência: enquanto as teorias são mais abrangentes e, os modelos são entidades mais limitadas, que podem ser aplicadas nos princípios gerais das teorias. Quanto à relação modelo e realidade, compartilhamos a posição de Giere (1992 e 1999): esta relação é de similaridade, ou seja, o modelo não é real, porém tem valor de semelhança ao sistema real em alguns aspectos e graus.

Portanto, pensar a Química por meio de modelos é uma especificidade da linguagem química. Nosso argumento sugere que, em ligação química, não se pode saber como as moléculas são em si mesmas, nem observar as forças que agem entre elas; o que nós acreditamos saber sobre elas é realmente o que é conhecido por meio de modelos, os quais são construídos devido aos nossos interesses e fins de investigação; trata-se de uma perspectiva pragmática. Nesse sentido, nossa visão se aproxima de Black (1962), o qual admite que a reflexão que se faz acerca

dos modelos parte da dimensão pragmática, ou seja, as condições que os modelos têm de satisfazer para que sejam utilizados pelos cientistas.

2.7 OS MODELOS E OS REALISMOS NA FILOSOFIA DA CIÊNCIA

A importância da Filosofia da Ciência para a educação científica tem sido amplamente reconhecida na literatura nas últimas décadas. Nesta seção, procura-se entender o que a Filosofia da Ciência tem a dizer sobre os modelos na Ciência, sobretudo, a visão dos realistas e antirrealistas, nesse processo.

Segundo a ótica realista, consiste, de maneira resumida, na alegação de que as teorias científicas aceitas são descrições aproximadamente verdadeiras da realidade nos domínios respectivos, o que inclui alegações sobre a existência de entidades que não podem ser diretamente observadas, os modelos. Por sua vez, com base em Chibeni (1993), o termo realismo refere-se a uma posição filosófica relativa a classes de objetos, como, por exemplo, as entidades não observáveis das teorias científicas. Assim, essas entidades (os elétrons, por exemplo) têm sido objeto de debate entre realistas científicos e antirrealistas.

Vale salientar, que para algumas correntes do realismo o modelo tem correspondência com a realidade ou compromisso com a verdade. Nesse sentido, Van Fraassen (2007, p. 27), ao comentar sobre a perspectiva realista, afirma: “[...] a ciência visa dar-nos em suas teorias um relato literalmente verdadeiro de como o mundo é, e a aceitação de uma teoria científica envolve a crença de que ela é verdadeira.” Diante desse contexto, Van Fraassen, contra os realistas, diz que não é preciso acreditar nas teorias científicas para que elas sejam verdadeiras; ao invés disso, convida-nos a utilizar dois termos, o de “aceitação” e o de “adequação empírica.”

Assim, Van Fraassen (2007, p.12) acredita que “[...] o objetivo da ciência é nos fornecer teorias empiricamente adequadas, e a aceitação de uma teoria envolve apenas uma crença de que ela é empiricamente adequada.” O argumento do autor sugere que se podemos aceitar ou não os postulados teóricos como adequados empiricamente depende de em que medida eles conseguem explicar os fenômenos investigados e como estes apelam para nossa intuição. Dentro desse contexto, uma teoria é considerada empiricamente adequada se de certa forma ela “salva os fenômenos” observáveis. Assim, a adequação empírica deve acontecer somente

frente a uma relação entre dois dos três modelos que constituem a teoria; quando há uma relação de isomorfismo (parcial) entre a subestrutura empírica e as aparências (ou os modelos de dados, para ser mais exato).

De acordo com Dutra (2001, p.58), “Van Fraassen apela para a noção geométrica de isomorfismo, e diz que duas estruturas são isomórficas se elas se encaixam uma na outra perfeitamente.” Para Van Fraassen (1980), aceitar uma teoria é, portanto, acreditar que ela é empiricamente adequada. Em seu livro, contudo, intitulado: *A imagem científica*, ele argumenta que “[...] não há nenhum bom motivo”, ou melhor, boas razões para acreditar que as boas teorias são verdadeiras, tampouco para acreditar que as entidades postuladas por elas são reais. Para o realista, em geral, conforme encontramos em Boyd (1973), a aceitação de uma teoria ocorre por que ela é aproximadamente verdadeira. A concepção de verdade como correspondência alega que se uma teoria (logo, o modelo) é verdadeira, o que descreve corresponde à realidade. Entretanto, a questão que se faz ao realismo científico é saber se as entidades postuladas pelas teorias científicas, que se refere a aspectos do mundo inacessíveis à observação direta, representam o conhecimento genuíno.

Diante dessa discussão, duas questões são colocadas atualmente para os realistas: As entidades teóricas (elétrons, por exemplo), postuladas pelas teorias científicas, existem? Uma possível resposta seria: depende da interpretação. Giere (1992b) acredita que os termos teóricos (não observáveis) constituem uma referência a entidades com existência própria na realidade; segundo esse autor, as entidades são instrumentos de investigação. Outra questão comum no debate: O que legitima a postulação de entidade de processos inobserváveis na Ciência? Putnam (1975, p. 73) propõe um argumento a favor do realismo científico, o “argumento do milagre”:

[O realismo] é a única filosofia que não faz do sucesso da ciência um milagre. Que os termos nas teorias científicas maduras tipicamente são referenciais [...]; que as teorias aceitas numa ciência madura são tipicamente aproximadamente verdadeiras; que o mesmo termo pode referir à mesma coisa mesmo quando ocorre em teorias diferentes, tais proposições são vistas pelo realista científico não como verdades necessárias, mas como parte da única explicação científica do sucesso da ciência.

De acordo com Putnam, se não existissem as entidades que a Ciência postula, como explicar o seu êxito em dar previsões, se essas próprias entidades não existissem? O teórico ainda aponta que a melhor justificativa que se tem para o esse êxito são as suas afirmações apontadas pelos realistas científicos. Vale ressaltar que Putnam, ao transitar entre as correntes filosóficas (até passar a ser um antirrealista), nesse momento, ao comentar sobre o êxito da Ciência, apresenta uma cota de pensamento a favor do realismo científico.

Dentro da literatura especializada, verifica-se também a existência de formas brandas de realismo – o realismo de entidades e realismo estrutural. Assim, para o realista de entidades, existe uma concepção concreta da verdade, ou seja, a real existência de determinadas entidades propostas pela Ciência. Porém, sob o ponto de vista da Mecânica Quântica, Labarca, Bejarano e Eichler (2013, p. 5) consideram:

Um orbital é apenas uma ferramenta matemática para expressar tal probabilidade, que é definida mediante uma função matemática (uma função de onda Ψ) que constitui uma solução para a equação de Schrödinger para, por exemplo, sistemas de apenas um elétron, isto é, um orbital atômico para o átomo de H ou um orbital molecular para o H_2^+ . Por esse motivo, os físicos e os químicos computacionais utilizam orbitais como meras ficções matemáticas úteis para o cálculo.

De acordo com Labarca e Lombardi (2010), compreensões acerca do orbital – função de onda e densidade de probabilidade – podem coexistir do ponto de vista ontológico e epistemológico, implicando dois tipos de orbitais: orbitais da Química, entendidos como densidade de probabilidade de natureza realista; e orbitais da Mecânica Quântica (essencialmente os da interpretação positivista), admitidos como função de onda e de natureza antirrealista.

De acordo com Cartwright (1983), o realista de entidades acredita na existência das causas (entidades) e que a ciência pode obter conhecimento a respeito dessas entidades (por exemplo, elétrons, etc.) que não são diretamente observáveis. Nessa perspectiva, aponta para a existência do comprometimento dos realistas com entidades inobserváveis. Aqui, o realista de entidade assume a posição filosófica de que as entidades postuladas pelas teorias científicas existem na realidade. Por exemplo, Lemes (2013) verificou em uma pesquisa que doutorandos de Química de diversas áreas, tais como Analítica, Inorgânica,

Orgânica, Físico-Química e Bioquímica, em sua maior parte, acreditam na existência de orbitais, bem como suas formas – particularmente aquelas apresentadas em livros didáticos. Outro teórico que defende o realismo de entidades é o Ian Hacking. Nesse sentido, Hacking (2012, p. 373) afirma:

Nós nos convencemos completamente da realidade dos elétrons quando regularmente tentamos – e frequentemente conseguimos – construir novos tipos de artefatos que se utilizam de diversas propriedades causais dos elétrons para interferir em outras partes mais hipotéticas da natureza.

Em contraposição, um antirrealista de entidade nega a posição de Hacking e Cartwright, dizendo: trata-se apenas de ficções úteis. Reforçando ainda esse debate, Musgrave (1985, p. 210) comenta:

O realista tem uma explicação pronta: as entidades postuladas pela teoria realmente existem, e o que a teoria diz sobre elas é verdadeiro (ou aproximadamente verdadeiro). O antirrealista parece ser forçado a dizer que ficções inventadas para um determinado propósito milagrosamente acontecem mostram-se bem adaptadas para um propósito muito diferente.

O realismo estrutural (outra versão branda do realismo) é dividido entre o realismo estrutural epistemológico e o ontológico. O realismo estrutural epistemológico aponta que todo o nosso conhecimento sobre o mundo, que está representado pelas teorias científicas, é estrutural; a Ciência não nos mostra nada que esteja além da estrutura, das relações entre as coisas. O realismo estrutural ontológico, entretanto, admite que tudo aquilo que conhecemos do mundo são estruturas porque as estruturas existem, e nada mais além delas.

Ao contrário do realista, o antirrealista não se compromete com os referentes da teoria, logo, com os referentes dos modelos, ou seja, não julga como necessário o comprometimento com entidades sob o ponto de vista ontológico. Para Silva (1998, p.8), “[...] 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.” Ainda, nessa perspectiva, os antirrealistas acreditam que “[...] as teorias são ferramentas intelectuais que não podem ser entendidas como relatos literais de como o mundo é” (HACKING, 2012, p.81). Já outros antirrealistas alegam que não temos ainda razões para acreditar que

as teorias estão corretas. Nesse sentido, o “[...] antirrealista também se nutre de ideias acerca do conhecimento, como uma doutrina que alegue que só podemos reconhecer como reais as coisas submetidas à experiência sensorial” (HACKING, 2012, p.85).

Ademais, Putnam (1981) aponta para a impossibilidade do acesso ao real, no sentido de que não podemos avaliá-lo ou descrevê-lo, segundo algumas premissas, ou seja, não existe uma descrição única, completa e verdadeira do mundo tal como ele é de fato. Para Putnam, há existência de certo subjetivismo quando julgamos a relação entre teoria e realidade, envolvendo o que ele denomina de aceitabilidade racional. Assim, de acordo com Putnam, a teoria não é exatamente a realidade, mas o melhor que temos até o presente momento.

Para antirrealistas como Van Fraassen (2007), a maior qualidade de uma teoria científica está na sua adequação empírica. Segundo o autor, uma teoria é aceita na ciência por que ela é capaz de prever determinados fenômenos, e não por que tem correspondência com a verdade. Van Fraassen (2007, p. 121) ainda alega:

A definição exata de adequação empírica não se reduz a noção de verdade, por que ela relaciona a teoria com os fenômenos reais (e não com qualquer coisa que aconteceria se o mundo fosse diferente, asserções que, a meu ver, não possuem qualquer base factual, mas apenas refletem as teorias de fundo com as quais trabalhamos).

Para Van Fraassen, entidades inobserváveis são ficções úteis, ou seja, sua visão se aproxima daquela explicitada por Musgrave. Assim, segundo o filósofo, os modelos científicos têm o compromisso de adequar-se aos fenômenos, não precisam ser verdadeiros em relação às entidades inobserváveis, sendo que o estatuto ontológico está apenas direcionado às entidades observáveis (ou seja, àquilo que podemos observar sem o auxílio de um instrumento, a olho nu). Ainda admite que a grande tarefa da atividade científica é construir modelos que devem ser empiricamente adequados, mas não precisam ser verdadeiros.

Daí entidades teóricas ou conceitos construtivos, como a molécula, devam ser associados com eventos observáveis. Para colocar de outra maneira, se a ligação entre entidades teóricas e os observáveis são estabelecidos pelas regras alegadas de correspondência, tais entidades podem ser consideradas relevantes para os objetos de explicação teórica. Por exemplo, quando um químico diz CH_4 tem uma estrutura tetraédrica em função de hibridização sp^3 , o conhecimento empírico

das propriedades químicas é sobreposta à noção de orbitais. É válido destacar, contudo, que realistas e antirrealistas concordam que capacidade preditiva é uma virtude epistêmica para aceitação das teorias, no âmbito científico.

2.8 SÍNTESE DA SEÇÃO

Esta seção mostrou o que pensam os filósofos da Ciência sobre os modelos, bem como a sua relação frente às teorias científicas. Analisando as principais visões dos autores sobre modelos, parece-nos evidente que os autores sinalizam que não há uma única definição de modelo, porém, é comum se utilizar o termo “representação” como sinônimo para explicar o significado.

O termo *modelos* assume caráter reconhecidamente polissêmico, sendo um dos maiores desafios da Filosofia da Ciência, a partir da década de 1960, organizar essa polissemia. Os filósofos da Ciência têm destacado que tal polissemia constitui um obstáculo tanto para o Ensino de Ciências, quanto no próprio campo da Ciência.

De acordo com a literatura, os filósofos admitem que os modelos podem levantar questões de semântica (função de representação dos modelos); por outro lado, um modelo pode representar uma teoria, no sentido de que ele interpreta as leis e axiomas dessa teoria, a Ontologia – o que são os modelos – e a Epistemologia – como podemos aprender com os modelos na Filosofia da Ciência – que se baseiam na forma pela qual os modelos se relacionam com a teoria, bem como as suas implicações para a Ciência. Pode-se verificar, também, a existência de correntes da Filosofia da Ciência que entendem o papel dos modelos de maneiras distintas. Nesse sentido, Suppe (1989, p.167) admite que “a palavra ‘modelo’ deve ser utilizada com extremo cuidado, uma vez que ela pode significar algumas coisas diferentes na Ciência.” Contudo, o seu entendimento depende da corrente filosófica na qual está inserido, ou seja, a corrente sintática, semântica e mediadora.

3 OS MODELOS NA FILOSOFIA DA QUÍMICA

Continuando a discussão, explicitada na seção 2, este que se inicia tem como objetivo explorar os autores da Filosofia da Química, visando entender a especificidade da linguagem química, especialmente os modos de explicação química. Para tanto, utilizaram-se a representação e a linguagem como um dos seis campos estruturantes necessários para uma epistemologia da ciência orientada à formação de professores, defendido por Adúriz-Bravo (2001). Este campo refere-se:

A operação pela qual o conhecimento sobre o mundo, que provém de processos cognitivos de modelização, se objetiva e se comunica mediante conjuntos organizados de ferramentas simbólicas, que constituem linguagens em sentido amplo (ADÚRIZ-BRAVO, 2001, p.167).

“Um campo epistemológico tem como objetivo garantir que, sem saber demasiada epistemologia, seja possível escolher ideias meta-teóricas diretamente associadas à melhoria da educação científica” (ADÚRIZ-BRAVO, 2001, p.137). Para esse autor, um campo estruturante é formado por conjunto coerente de ideias estruturantes ligadas por sua afinidade temática, encontradas em textos da Filosofia da Ciência com perguntas fundamentais, analogias clássicas, exemplos paradigmáticos e autores que outorgam identidade a uma disciplina acadêmica. As ideias estruturantes são conceitos disciplinares de alto nível de generalidade e de inclusividade ausubeliana (AUSUBEL et al., 1976; GALAGOVSKY, 1996), capazes de organizar os diversos conceitos presentes de uma disciplina.

Concordando com Merce-Izquierdo (2012), admite-se que a linguagem, é uma das dimensões cognitivas necessárias à aprendizagem conceitual, tendo como base a Psicologia Cognitiva. Nesse sentido, pensar acerca dos problemas, tensões e especificidade da linguagem química implica aspectos meta reflexivos e, desse modo, exigem instrumentos do campo emergente da Filosofia da Química (RIBEIRO, 2014). Peirce e Frege, consideram que pensar por meio de modelos é uma especificidade da Química (VAN BRAKEL, 2012).

Apesar da relevância sinalizada por Adúriz-Bravo (2001), por outros autores da educação científica e por educadores químicos, a especificidade da linguagem química é muito pouco explorada. Em Química, esse estudo é discutido pela

Filosofia da Química que emerge na Filosofia da Ciência, tendo como marco de sua institucionalização o ano de 1994 (RIBEIRO, 2014). Assim, para a discussão do campo, entre os autores destacamos: Woolley (1978); Primas (1981,1983,1985); Schummer (1997, 1998, 1999, 2000, 2006), Tomasi (1999); Hendry (1999); Van Brakel (1999, 2000); Mainzer (1999); Zeidler (2000); Woody (2000); Scerri (2000, 2007); Klein (2001); Del Re (2000); Laszlo (2000); Earley (2003, 2012); Vihalemm (2007); Goodwin (2008, 2010); Labarca, Bejarano e Eichler (2013); Erduran e Mugaloglu (2014); Ribeiro (2014). Adotaram-se fundamentalmente esses pesquisadores em função de terem realizado pesquisas de grande importância nesse campo disciplinar e pelas diversas contribuições de suas pesquisas para a Filosofia da Química.

3.1 A FILOSOFIA DA QUÍMICA E A LINGUAGEM QUÍMICA

A Química tem sua própria linguagem (SCHUMMER, 2006; GOODWIN, 2008, 2010). Para Ribeiro (2014), no que diz respeito aos modelos e à explicação estrutural, essa linguagem apresenta uma diagramaticidade e semiótica própria. Adúriz-Bravo (2001) acrescenta que tanto modelos como teorias, em suas representações, se expressam e se comunicam mediados por diversos tipos de linguagem, tais como: linguagem científica formal, várias linguagens simbólicas, linguagem computacional, equações, fórmulas, gráficos, analogias, simulações, entre outros.

Alguns trabalhos recentes sobre a natureza das línguas naturais sugerem que a linguagem é principalmente uma conquista cultural (CLARK, 1997; TOMASELLO, 1999). Argumentos têm sido propostos para caracterizar a Química como uma língua. Por exemplo, Laszlo (2012) argumenta que a analogia da linguagem leva a reconsiderar o habitual posicionamento da Química, na classificação das Ciências, entre Física e Biologia. Para esse autor, a Química deveria ser ensinada de maneira semelhante a uma língua, a partir de uma linguagem química icônica, de fórmulas e equações, uma arte combinatória. Jacob (2001) define Química como uma ciência experimental que transforma ambas as substâncias e a linguagem. O autor ainda argumenta que é fundamental distinguir não apenas experimentos químicos e linguagem química, mas também os diferentes

níveis da linguagem química. Assim, classifica os níveis de linguagem química em símbolos para substâncias químicas, vocabulário (*ideators* e *abstractors*) que possibilita aos químicos dialogar sobre as substâncias em geral, usando termos (teorias e leis) para discutir abstrações e linguagem da filosofia (teorias, sua origem e da sua base empírica). O autor, ainda enfatiza a necessidade de compreender o uso da língua dos químicos, bem como as normas que regem o uso da linguagem química e as consequências que a utilização dessa língua tem para a Química como um todo. Amparado nesses autores, aprender uma língua é aprender a ser um membro de uma cultura com suas histórias e costumes.

Kaya e Erduran (2013) focalizam o conceito de dualidade, linguagem química e explicações estruturais, para ilustrar como os livros didáticos de Química poderiam ser melhorados com *insights* de tal trabalho. Giere (2004) argumenta que a linguagem da Ciência apresenta uma sintaxe, uma semântica, e, por fim, uma pragmática. Embora a sintaxe seja considerada importante, a semântica, que inclui noções básicas de referência e de verdade, tem recebido mais atenção, segundo o autor.

Adúriz-Bravo (2001), argumenta que recuperamos a visão contemporânea linguística da Ciência. A epistemologia clássica analisava a linguagem científica em termos de conceitos e relações entre eles. As visões atuais, desde uma perspectiva mais próxima da pragmática a retórica (GROSS, 1990), recuperam o valor da abdução, analogia e metáfora como mecanismos de construção de sentido da Ciência erudita e escolar (GRECA; MOREIRA, 1998; IZQUIERDO, 1999a; OSBORNE, 1999), uma vez que advogam por uma concepção multissemiótica da linguagem científica, que inclui, de maneira coordenada, as distintas formas de representação. Essa concepção contemporânea da linguagem científica recupera a notável importância do processo analógico da Ciência erudita e escolar (ADÚRIZ-BRAVO, 2001).

Na área da Química, o campo da linguagem é aprofundado pelo emergente campo da Filosofia da Química que surge na Filosofia da Ciência. Conforme já acordado, o tema linguagem química, recentemente, recebeu atenção de dois periódicos principais, a *Foundations of Chemistry* (revista voltada para os químicos) e a *Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry* (revista direcionada aos filósofos da química). De acordo com Ribeiro (2014), os temas mais discutidos foram: modelos químicos, natureza da explicação, leis e teorias químicas, conceitos

químicos. Identificaram-se também outras discussões: o uso de modelos e suas relações de congruência (ver, por exemplo, HENDRY, 1999; TOMASI, 1999); a autonomia da química (ver, por exemplo, VAN BRAKEL, 1999); modelos moleculares (ver, por exemplo, HENDRY, 1999; MAINZER, 1999, LASZLO, 2000, ZEIDLER, 2000); modelos e analogias na Ciência (ver, por exemplo, DEL RE, 2000); a questão do fisicalismo (ver, por exemplo, HENDRY, 1999); o estatuto epistemológico dos modelos teóricos (ver, por exemplo, ZIDLLER, 2000); modelagem de sistemas complexos (ver, por exemplo, VAN BRAKEL, 2000; AKEROYDE, 2000; TRINDLE, 1999).

Nos artigos da *Foundations of Chemistry*, Klein (2001) estuda a semiótica química, aspectos epistemológicos e históricos de fórmulas da química berzeliana.

3.1.1 Modelos, leis, teorias e as explicações em Química

Um conjunto de artigos se concentra na natureza do conhecimento químico, particularmente em relação aos modelos, explicações e teorias (ERDURAN; MUGALOGU, 2014). “A construção de modelos é uma atividade central na prática científica da química” (LABARCA, 2006, p.63). Weisberg (2004) comenta que a Química propõe modelos qualitativos para embasar suas explicações. Para Earley (2003), a Química e a emergente Filosofia da Química têm contribuído para a contínua discussão filosófica acerca da natureza da explicação científica. Nesse sentido, uma agenda de questões relacionadas à natureza epistemológica dos modelos e a forma como são utilizados nas explicações químicas tornaram-se uma área de crescente interesse na Filosofia da Química.

Sobre essa base, questiona-se, por exemplo: Qual é a natureza dos modelos químicos? Como estes modelos explicam a química contemporânea, em particular, ligação química? Qual a relação entre a estrutura e a forma e a utilização de modelos de explicação química? (HARRÉ, 2003a).

De acordo com Harré (2003a), o uso ubíquo de modelos visuais que caracterizam a Química exigem explicações de natureza extralinguísticas. Para o autor, a utilização ubíqua dos modelos em Química é um indicativo de sua importância para a explicação química. Ainda argumenta que na explicação química os modelos são centrais e que se pode aprender muito com o debate contemporâneo na Filosofia da Ciência relativa à autonomia dos modelos. Fisher

(2003) reforça a visão de Harré (2003a) o qual aponta que o uso ubíquo de modelos visuais demanda uma conta de explicação com uma base extralinguística. Nesse sentido, Fisher destaca a centralidade da visão semântica das teorias científicas, uma vez que fornece meios para o entendimento do modelo autônomo e constitui um forte potencial para articular a autonomia da explicação em química. Assim como Harré, Fisher sugere que os usos de modelos moleculares e estruturas químicas são modos únicos de explicação química.

Oh e Oh (2011, p.1118), ao comentarem sobre uso dos modelos na química, alegam que “[...] a química é uma disciplina a qual se utiliza de diversos tipos de modelos em diferentes níveis, desde o nível observacional/macrosscópico e o simbólico com fins de investigação e ensino.” Em seguida, Del Re (2000) argumenta que uma reflexão sobre os modelos na ciência é um capítulo de qualquer estudo sobre a relação entre a realidade sensível e os procedimentos pelos quais a ciência deriva conhecimento sobre o assunto. Assim, ao comentar sobre a natureza e o significado dos modelos, sugere que seu entendimento pode ser concebido de duas formas: pela “compreensão por exemplos” (ou seja, a ideia é tentar entender o que os modelos são por meio de exemplos, de acordo com a prática da educação moderna) e por seus “usos” (o importante é saber como usá-los).

De acordo com Del Re (2000), modelos são ferramentas do pensamento químico. Nesse sentido, o autor, sugere dois tipos de modelos: modelos matemáticos (ferramentas do pensamento analógico argumentativo) e modelos físicos (ferramentas do pensamento analógico descritivo). Ao focar sobre modelos físicos, argumenta que são ferramentas fundamentais não somente da descrição científica do mundo “exterior”, mas da cognição do homem, especialmente no que se refere às coisas que não estão diretamente acessíveis aos sentidos. Assim, utiliza o modelo de bola e palito (ou sua variante mola-e-bola) da Química como exemplo mais instrutivo de um modelo físico. Para ele, modelos físicos servem como referenciais para analogias indispensáveis para a compreensão dos níveis submicroscópicos da realidade. Ainda aponta que modelos físicos são objetos que pertencem ao mundo acessível à experiência direta do homem, construídos muitas vezes *ad hoc* e, possivelmente, idealizados. Acredita-se que a analogia entre os modelos e as estruturas moleculares, por exemplo, pode facilitar o estudo da constituição, da configuração (ou seja, da estrutura tridimensional) e das diferentes conformações, as formas que uma molécula pode obter.

Sobre esse estilo de pensar químico, filósofos da Ciência consideram que os modelos são tão necessários nas descrições científicas do mundo natural que se pode dizer que entender a ciência é entender os modelos usados pelos cientistas. Além de sua importância na pesquisa científica, vem sendo reconhecido também o papel fundamental dos modelos na comunicação do conhecimento e, por extensão, no ensino das ciências. Zeidler (2000) argumenta que a prática de pesquisa teórica da Química consiste, em grande medida na construção de modelos teóricos. Ao discutir sobre o estatuto epistemológico dos modelos teóricos, o autor problematiza o caráter dinâmico, em contraposição ao caráter estático das representações químicas das estruturas moleculares. Para ele, os modelos não podem ser tratados como representações de sistemas empíricos reais, mas podem desempenhar um papel muito importante na prática experimental.

Em *The preference of models over laws of nature in chemistry*, Schummer (2014) defende o uso dos modelos frente às leis da natureza. Nesse sentido, argumenta que a Química, como o epítome original da Ciência Experimental (ou baconiana), parte do pluralismo metodológico em que uma variedade de modelos para ser escolhido a partir de razões pragmáticas tem preferência sobre as leis universais da natureza como na Física Matemática. Schummer (2014, p.6), ao discutir sobre a natureza das leis químicas, alega:

Primeiro, elas são de grande valor didático. Expressa em equações matemáticas puras, que são fáceis de aprender por iniciantes e permitem desconsiderando as particularidades dos milhões de conhecidas substâncias diferentes. Além disso, uma vez que o seu estatuto de leis que limitam for compreendido, os alunos aprendem a lição valiosa que a ciência é muito mais difícil do que a formulação simples verdades gerais. Em segundo lugar, elas ainda são de grande valor prático para o cálculo de dados úteis em muitos casos, desde que o caráter aproximado é considerado e erros podem ser estimados com base na vasta experiência e conhecimento teórico dos seus pressupostos e limites. Em terceiro lugar, as leis do século XIX não eram a última palavra. Na verdade, qualquer uma delas - e muitas outras leis da química de cinética química à espectroscopia que não pode ser mencionada aqui por razões de espaço - foram desenvolvidas com sofisticação considerável em físico-química.

Para Schummer (2014), esses desenvolvimentos seguem um padrão típico que poderia proporcionar um novo significado para as leis em Química, e para a Física Experimental. Enquanto as leis foram inicialmente assumidas como válidas independente da natureza e concentração das substâncias específicas e outras

condições particulares, as suas versões refinadas incluem vários coeficientes (ou coeficiente funções) para lidar com essas particularidades. Por exemplo, o refinamento da lei dos gases ideais de Van der Waals; outro exemplo diz respeito a LEWIS, à substituição de concentrações de atividades e fugacidade (e seus coeficientes correspondentes) para lidar com misturas e soluções reais e química matemática (GAVROGLU; SIMÕES, 2012). As equações matemáticas simples, desse modo, transformaram-se em complexas, com diversos parâmetros que precisam ser determinadas independentemente para cada caso específico - duas abordagens têm sido realizadas em paralelo, completando uma a outro. Por um lado, a consideração teórica, principalmente a partir da termodinâmica estatística e da modelagem química quântica, pode ajudar a calcular os coeficientes, se eles têm um significado físico claro. Schummer (2014, p.10), ao comentar sobre as diferenças entre leis e modelos em Química alega que:

As leis são formuladas com reivindicações universais da verdade, que mais tarde podem ser reduzidos por *ceteris paribus* condições ou estendidas pela redução de outras leis. Os modelos são desenvolvidos com a descrição aproximada de casos exemplares, o que pode ser cuidadosamente alargada a outros casos por uma modificação e sofisticações que incluem parâmetros para cobrir as suas particularidades. Enquanto a lei é a melhor quanto mais universal que é, um modelo é melhorado precisamente pelo cálculo, ensaios e limita o seu âmbito de utilização pretendida com estimativas de erro. Não pode haver duas ou mais leis da natureza competindo umas com as outras por muito tempo, porque há apenas uma natureza que qualquer lei tenta descrever de forma verdadeira e completamente. Diferentes modelos para o mesmo campo de aplicação pacificamente podem coexistir e se completam de forma, porque eles podem empregar diferentes aproximações ou colocar ênfase diferente em diferentes tipos de questões e aspectos. Ambas as leis e modelos são ferramentas comparáveis para explicações e previsões, mas as leis assumem o poder explicativo exclusivo enquanto os modelos podem explicar apenas os aspectos que tenham sido construídos para fazê-los.

O mesmo autor (2014) ainda acrescenta que, as leis, se confrontadas com problemas graves, devem ser totalmente abandonadas, resultando em descontinuidades da ciência, enquanto que os modelos podem ser flexíveis, ajustados ou completados por novos modelos. Caldin (1961), escrevendo sobre a natureza das leis e teorias químicas, problematiza que elas não têm o mesmo sentido que as leis e teorias da Física. As leis químicas, segundo esse autor, são peculiares, não têm o sentido de universalidade, funcionam mais no sentido de

regras para a ação do que como leis gerais para explicação. Um exemplo seria a lei periódica dos elementos: “[...] a ocorrência periódica dos elementos, após certo intervalo, é apenas aproximada” (SCERRI, 2000b, p.523). Essa distinção sugere que as leis da natureza podem ter diferenças ao tratar cada disciplina científica específica. Na atualidade, Vihalemm (2003, 2011) tem sido um dos filósofos que mais tem explorado o contexto da natureza das leis químicas.

Em relação às semelhanças e diferenças entre as explicações químicas e as explicações de outras ciências, em especial, as explicações físicas, Brown (2003) aponta a necessidade de considerar a natureza metafórica das explicações científicas em geral. Nessa perspectiva, o autor faz uso de exemplos da Química Orgânica, visando a argumentar que os modelos utilizados pelos químicos são tidos como instrumentos explicativos, metafóricos por natureza e distintos das representações explicativas usadas em outras ciências. Sobre a mesma temática, Goodwin (2003) sugere uma descrição fenomenológica da explicação no contexto da Química Orgânica. Del Re (2003) aprofunda a relação entre os mecanismos de reação química e a explicação química.

De acordo com Woody (2000), o discurso explicativo diz o que devemos querer saber sobre o mundo e como devemos pensar para chegar lá. Assim, pensando na relação entre os modelos e a explicação química, Weisberg (2004) sugere que essa relação pode ser expressa pela norma a seguir: se precisamos de explicações químicas, então precisamos construir modelos qualitativos. Woody (2004) explora a relação entre representação e explicação na Ciência e, nesse sentido, sugere que as representações científicas podem ser vistas como ferramentas pragmáticas. Para esse autor, certas representações alcançam o *status* de ser paradigmaticamente explicativas, de maneira que modelos moldam assim a inteligibilidade. Ainda admite que as representações científicas, devem ser vistas como ferramentas pragmáticas. Conclui alegando que a natureza pragmática do discurso explicativo concede efetivamente a sua utilidade intelectual. A diversidade observada de estruturas explicativas deriva dessa mesma fundação pragmática. Contudo, Woody (2004) e Giere (2004) compartilham da ideia, ou seja, a representação com foco pragmático.

No contexto da educação, Justi e Gilbert (2002) defendem a integração da Filosofia da Química com base na importância dos modelos na Educação Química e nas contribuições da Filosofia da Química. Justi (2006) aponta o caráter

diagramático da linguagem química e ainda ressalta a importância dos modelos na explicação química e da modelagem como técnica de ensino. Segundo a autora, os modelos são esquemas ou estruturas que correspondem a objetos reais, eventos ou classes de eventos com poder explicativo. Sendo que, a aquisição de conhecimento declarativo é uma das funções dos modelos. Entretanto, os modelos ainda são usados de forma implícita na explicação dos fenômenos químicos e geram grandes dificuldades no seu uso. O uso acrítico no ensino apresenta os modelos químicos aos estudantes como versão final de nosso conhecimento da matéria, muitas vezes como cópias reais de moléculas. Os modelos são dados prontos e acabados, como cópia fiel da realidade. Dentro dessa perspectiva é difícil colocar questões relacionadas à avaliação, revisão e desenvolvimento dos modelos químicos.

Uma série de artigos tem discutido as confusões em torno do entendimento dos modelos químicos, assim como alega Justi (2006). Erduran, Adúiz-Bravo e Naaman (2007) chamam atenção para os muitos problemas da aprendizagem em Química que podem ser caracterizados por uma confusão de modelos, confusão que gera outra possível fonte de problemas de aprendizagem, os linguísticos, por exemplo: a camada de elétron é entendida, às vezes, como uma proteção; a reação de neutralização é entendida como atingir uma solução neutra. Sobre esse problema Ribeiro (2014, p.253), alega que a confusão:

Ofusca também o problema central nas explicações químicas: a regra do octeto é generalizada para racionalizar a ligação química, ofuscando-se as interações elétricas; a explicação da eletronegatividade é explicada por esquemas, ofuscando-se sua natureza elétrica.

Vemulapalli (2008) problematiza as duas teorias, a ligação de valência e a ligação do orbital molecular como as duas principais teorias da ligação química. O autor observa a que a teoria de ligação de valência foi a preferida pelos químicos, já a teoria do orbital molecular, quase foi desprezada. Para ele, o motivo da escolha da teoria de valência decorre de que ela fornecia uma concepção rápida das suas propriedades, o que na época era suficiente para explicar os fenômenos. Hendry (2006, 2008) problematiza alegando que a Teoria do Orbital Molecular (TOM) não é uma teoria da ligação química.

Schummer (2004) examinou 300 artigos de pesquisa em Química e acabou concluindo que a atividade experimental dos químicos difere da dos físicos, de modo

geral, pois ela não tem como foco testar teorias. Sua análise apontou para a característica acumulativa da Química, que é produzir novas substâncias e não avaliar teorias. A experimentação, para os químicos, está vinculada à síntese e à análise química e as teorias são entendidas como ferramentas para a pesquisa experimental.

Com a intenção de compreender o papel das teorias quântica na Química, Caldin (2002) defende que as teorias químicas são resultados de construções e não de deduções com base em teorias físicas. As práticas em Química não são feitas para testar hipóteses teóricas (CALDIN, 1961). Concordando com Hoffmann (1993, 2007), Ribeiro admite que os químicos, não fazem o uso da mediação dos instrumentos para entender o fenômeno natural, conforme os físicos, mas, concebem a teoria como narrativa de experimentos, construindo histórias enquanto criam moléculas. Assim:

No tocante às teorias químicas, [...] diferentemente do que ocorre na física, que busca explicar fenômenos, recorrendo em sua grande parte ao princípio da causalidade, na química as teorias são narrativas e seus modelos e representações não pretendem falar necessariamente sobre o mundo, mas servir de ferramenta para intervir e transformar a natureza. Os modelos químicos não foram feitos para se referir ao real, mas para trabalhar com ícones representacionais que permitam intervir no real. Eles mostram o que é teoricamente possível e não o que é real. Dessa forma, uma síntese química não pode ser deduzida por um conjunto de leis. Átomos e moléculas são apenas — “atores no drama” da transformação química (RIBEIRO, 2014, p.86).

Nesse sentido, as teorias em Química não têm como finalidade testar teorias (conforme os físicos); a intenção é melhorá-las. Goodwin (2009b) argumenta que as fórmulas estruturais não desempenham o papel de portador da verdade; porém, elas contribuem para a formação dos argumentos e explicações da Química Orgânica. Propõe o papel das fórmulas estruturais como modelos, a partir da análise conformacional e das propriedades do 1,3 dimetil cicloexano. Akeroyd (2000) problematiza o avanço da explicação na Química Orgânica, entre 1930 e 1942.

Portanto, concordamos com Scerri (2000) que explicações e modelos químicos são genuinamente específicos do nível químico e, portanto, autônomos em relação às outras Ciências, em particular, à Física.

3.1.2 O problema da explicação estrutural

Segundo Mainzer (1997), o conceito de estrutura molecular é um tema central na pesquisa e na práxis química. Acerca dessa temática, é possível, identificar, em meio aos debates travados nesse campo, questões tais como: A estrutura molecular é redutível ou não? É um simples conceito ou tem alguma correspondência com a realidade? É relevante para a noção de identidade molecular?

Em relação à estrutura molecular,

Sabe-se que a aproximação de Born-Oppenheimer é essencial para relacionar a descrição química e a descrição quântica dos sistemas moleculares. A aproximação de Born-Oppenheimer se fundamenta, para efeito de cálculo, na separação do núcleo e do movimento dos elétrons. Essa aproximação ocorre em duas etapas: em um primeiro passo se ignora o movimento dos núcleos, negligenciando sua energia cinética, e se resolve a equação de Schrödinger apenas para os elétrons; em um segundo momento é reintroduzida a energia cinética dos núcleos. Essa técnica produz resultados aceitáveis com base no pressuposto de que os núcleos se movem lentamente, em relação aos elétrons, por que a massa M do núcleo é muito maior do que a massa m dos elétrons (LABARCA; BEJARANO; EICHLER, 2013, p. 4).

Porém, um debate que tem se intensificado ao longo dos anos diz respeito à discussão se o conceito de estrutura molecular sobrevive além de tal aproximação (TRINDLE, 1980; BADER, 1990). Acrescentando a isso, embora tal aproximação seja uma poderosa e útil ferramenta, não é necessária nem suficiente para formular o conceito de estrutura molecular. Entretanto, o conceito de estrutura molecular é um tema central nas explicações químicas e, sobretudo, na identidade das moléculas.

A discussão teve início a partir do artigo de Woolley (1978), onde ele apontou a contraposição da noção de estrutura com base na teoria quântica em relação à noção clássica e, portanto, não sendo propriedade intrínseca dos sistemas químicos (WOOLLEY, 1985). O mesmo autor argumenta que a noção de forma ou estrutura molecular é “o dogma central da ciência molecular.” Com isso, a estrutura molecular constitui o cerne da explicação da reatividade química (ou seja, a forma que as substâncias químicas se combinam). O problema é que o conceito de

estrutura molecular não parece encontrar um lugar no marco teórico da Mecânica Quântica, como as noções clássicas, por exemplo, as posições dos elétrons na estrutura de LEWIS. Woolley, em seu artigo, comenta ainda que o conceito de estrutura química não pode ser deduzido a partir da Mecânica Quântica, porque o programa reducionista falha na explicação química.

Hendry (2004, 2008, 2010) trata a questão da estrutura molecular no contexto do problema da redução. O autor acredita que a redução deve ser discutida no âmbito ontológico, uma vez que a irreducibilidade epistemológica (interteórica) da Química para a Física é indiscutível: inclusive o reducionista sabe que “[...] as equações exatas não têm solução [...] os modelos semiempíricos são aproximações aos tratamentos rigorosos que se encontram no seio das explicações do fenômeno da ciência especial” (HENDRY, 2010, p.184).

Labarca, Bejarano e Eichler (2013) ainda apontam que a controvérsia sobre o estatuto epistemológico do conceito de estrutura molecular provocou um extenso debate nos últimos anos na Filosofia da Química. De acordo com esses autores, o surgimento de conflitos acerca da interpretação do conceito de estrutura molecular provém da origem da Mecânica Quântica, onde a noção de estrutura carece de significado devido à indeterminação da posição e da trajetória das entidades moleculares. Entretanto, o conceito de estrutura molecular é um tema central nas explicações químicas e, sobretudo, na identidade das moléculas.

Para Del Re (2000), a questão que se coloca nesse debate é: “Uma molécula tem estrutura?” Primas (1983) considera que a estrutura molecular é apenas uma metáfora que não tem correspondência com o real descrito a partir da Mecânica Quântica. Nessa perspectiva, é posta em dúvida a ideia fundamental de que as moléculas são construídas a partir de átomos, que retêm sua identidade dentro da molécula (WEININGER, 1984). Del Re (2000) defende que uma molécula tem uma estrutura na medida em que ela tem propriedade análoga à estrutura do seu modelo (por exemplo, de mola-e-bola). Para esse autor, o conceito explicativo básico de Química, estrutura molecular, é definido em termos do modelo de mola-e-bola desenvolvido na ideia de Kekulé, em 1858.

Erduran e Mugaloglu (2014) comentam que a presença de modelos em diferentes disciplinas, tais como a Psicologia Cognitiva, Filosofia da Ciência, Química ou Educação, torna ainda mais difícil chegar a uma definição única para o termo “modelo” para fins educacionais. Cintas (2002) analisa o contexto histórico e

filosófico do conceito de estereoquímica de Vant't Hoff e Lebel. Sukumar (2009) defende que o conceito de estrutura molecular necessita ser visto além da aproximação Born-Oppenheimer, que se resume, na Química, aos modelos tipo bola-vareta. Em relação à noção de estrutura molecular, admite-se que ela é fundamental para a relação entre a descrição química e a descrição quântica nos diversos sistemas moleculares. A aproximação de Born-Oppenheimer é baseada na separação do núcleo e do movimento dos elétrons que ocorre em duas etapas.

Para Van Brakel (1999), o conceito de estrutura apresenta diversos significados a depender dos diferentes níveis de descrição, tais como: estrutura como sumário de possibilidades de reações; estrutura geométrica das moléculas no nível micro: espacialidade e organização dos átomos, estruturas cristalinas; estrutura de valência: no nível micro dos átomos e ligações entre átomos, configuração eletrônica; estruturas matemáticas da mecânica quântica usadas na descrição de um sistema particular.

Verifica-se que o conceito de estrutura ocupa grande parte do debate da Filosofia e da Química, sendo o foco principal da possibilidade de redução da Química à Mecânica Quântica. Entretanto, como se pode observar, questiona-se na literatura filosófica sobre a natureza do referente da estrutura molecular. Sobre esse debate, acredita-se que está longe ainda de ser resolvido, uma vez que as posições entre conceitos quânticos e a noção de estrutura molecular divergem de forma significativa.

3.1.3 O problema do reducionismo

Um dos temas de maior destaque na Filosofia da Química é o problema do reducionismo, ou seja, se a Química pode ser reduzida à Física de forma completa; e se os fenômenos químicos podem ser explicados por conceitos da Física, em particular, os da Mecânica Quântica.

Hendry (1999) acredita que não há motivos, ou melhor, boas razões para aceitar a integridade da Física e que isso não é uma tarefa urgente. Ao comentar a alegação de que a Física é causalmente completa, ou fechada, defende que modelos moleculares são uma das principais fontes de evidências, mas que, por mais inspeção que se faça, os modelos moleculares não apoiam a alegação de completude. Essa completude da Física normalmente aparece em uma série de

artigos como um lema. Para Lewis (1966, p.105):

A confiança na adequação explicativa da física é uma parte vital [...] de qualquer materialismo puro-sangue. É o fundamento empírico em que o materialismo constrói sua superestrutura de doutrinas ontológicas e cosmológicas.

Woody (2000) alega que alguns filósofos duvidam que as leis da Física, são suficientes para derivar a estrutura da teoria química. Sobre a mesma temática, Scerri (2007) comenta que a discussão sobre a redução está diretamente relacionada à possibilidade de que os conceitos em Química podem, ou não, ser reduzidos à Física (relação ambígua a que o autor se refere) mediados pela Mecânica Quântica, o que pode trazer implicações profundas para o Ensino de Química. Por exemplo, um dos possíveis impactos sobre o ensino de Química é a ênfase demasiada em aspectos quantitativos, em detrimento de aspectos qualitativos. Scerri (crítico da redução) sugere, como resposta à questão da redução: “Sim e Não”. De sua visão, podem se extrair duas possibilidades: a redução parcial da Química à Física; a Química reduzida e não reduzida ao mesmo tempo.

De acordo com Erduran e Mugaloglu (2014, p.295), o papel dos modelos na Química tem sido subestimado desde a formulação da Teoria Quântica. Segundo esses autores, houve um afastamento da Química qualitativa ou descritiva (que se baseia no desenvolvimento e revisão de modelos químicos) em direção à Química Quântica (baseada na teoria da Mecânica Quântica). Nesse sentido, “[...] a química tem emergido como uma ciência reduzida onde os modelos químicos podem ser explicados pelas teorias físicas.”

Lombardi e Castagnino (2010) mostram que uma das dificuldades do reducionismo da Química à Física está em aceitar o reducionismo a uma ontologia quântica que não se sabe ainda o que significa. Observa-se que o problema do reducionismo não está presente apenas do lado da Química, mas já se apresenta do próprio lado da Física, conforme afirma Papineau (1990, p.67): “[...] todos os eventos físicos são determinados (ou tem suas chances) totalmente por eventos físicos anteriores, de acordo com as leis da física.” Para Hendry (1999), os fisicalistas parecem concordar com o fisicalismo, propriamente dito, que envolve a reivindicação conhecida como integridade da Física. Isso implica que a Física por si só é vista como autossuficiente e que suas explicações não precisam fazer apelo às outras

ciências. Porém, segundo o autor, há duas formas de bloqueio quando se considera que a Física é completa: a autonomia e a universalidade da Física. Hettema (2009) problematiza o reducionismo na relação entre Física e Química com base na aproximação naturalizada de Popper sobre a redução. Van Brakel (2000) defende que a estrutura molecular não deve ser deduzida da Mecânica Quântica.

Sobre os conceitos de “redução”, se faz necessário distinguir redução ontológica de redução epistemológica. Para Labarca, Bejarano e Eichler (2013, p.3):

Em sua versão tradicional, a redução ontológica implica que as supostas entidades dos níveis não fundamentais da realidade (química, biológica, etc.) não são mais que entidades ou agregados de entidades pertencentes ao nível considerado fundamental (físico). Portanto, o reducionismo ontológico é uma tese metafísica eliminativista, que admite a existência real e objetiva de um único nível de realidade, onde os restantes níveis só possuem uma existência meramente subjetiva ou aparente. A redução epistemológica se refere à dependência lógica entre as teorias científicas: uma teoria pode ser reduzida a outra quando pode ser deduzida daquela. Assim, o reducionismo epistemológico resulta ser uma tese epistemológica segundo a qual a ciência pode (ou deve) ser unificada, deduzindo-se todas as teorias científicas a partir de uma única teoria privilegiada.

Admitindo-se uma relação estreita entre a Química e a Física, pode-se pensar que tanto modelos como as explicações químicas podem ser abordados do ponto de vista do reducionismo epistemológico. Nesse sentido, Scerri (2000), comenta que a Física deveria explicar de forma satisfatória a natureza dos modelos químicos e proporcionar explicações mais gerais e fundamentais do que as explicações químicas. Segundo esse autor, explicações e modelos químicos são genuinamente específicos do nível químico e, portanto, autônomos em relação às outras Ciências, em particular, à Física.

Na atualidade, tem-se uma estratégia contra o reducionismo científico que se refere a algumas perspectivas, e, entre elas, a emergência, a qual busca apreender os fenômenos por meio do estudo dos elementos que compõem um sistema. Os emergentistas admitem que, para explicar o que ainda falta descobrir no mundo, é necessário estudar melhor como é possível haver organização espontânea de grandes sistemas e, assim, como eles podem adquirir, às vezes, propriedades novas que não podiam ser antecipadas pelo estudo de seus componentes e dos intercâmbios entre eles. Por exemplo, em Química, a forma estável das moléculas e

de seus cristais, de modo geral, não pode ser definida por apenas uma molécula, mas por um sistema complexo. Outra questão é a da superveniência, que se refere à relação de dependência existente entre propriedade de um sistema global e as propriedades dos seus componentes.

No contexto da formação inicial e continuada de professores de Química, cabe chamar a atenção sobre a necessidade da discussão sobre a autonomia da Química frente a outras ciências, sobretudo, sobre a Física frente à Mecânica Quântica, conforme apontam os filósofos da química Scerri (2007) e McIntyre (1999). Conforme já indicado, Scerri defende uma relação ambígua na questão da redução e da própria Mecânica Quântica. O autor admite a existência da relação entre Química e a Mecânica Quântica na redução em termos naturalísticos até mais do que na visão axiomática. Porém, alguns filósofos aceitam que a redução epistemológica da Química é mais bem considerada como uma relação entre propriedades químicas e equações da Mecânica Quântica, mais do que uma relação de lógica entre teorias axiomáticas.

Cremos que o caráter redutivo atenta contra a autonomia da Química, uma vez que a coloca numa posição subordinada à Física. Kaya e Erduran (2011) comentam que o reducionismo no ensino de Química exclui possibilidades, o que pode dificultar o ensino-aprendizagem sobre a natureza do conhecimento químico. Apesar disso, nossa posição se aproxima da concepção de Labarca e Lombardi (2005) os quais defendem a autonomia da Química quanto aos aspectos epistemológicos e ontológicos.

3.1.4 A importância da diagramaticidade química

A diagramaticidade é uma característica fundamental da Química (GOODWIN, 2008; SCHUMMER, 1998, 1999, 2003a). Nesse sentido, Schummer (1998) defende a linguagem simbólica (ou seja, diagramática), as classificações e a pesquisa de materiais como núcleo da Química. Para Goodwin (2008), os diagramas fundamentam as explicações em Química e são tão potenciais quantos os utilizados na Matemática.

No ensino, algumas questões surgem: Como devemos trabalhar com representações e diagramas no Ensino de Química? Que tipos de representações

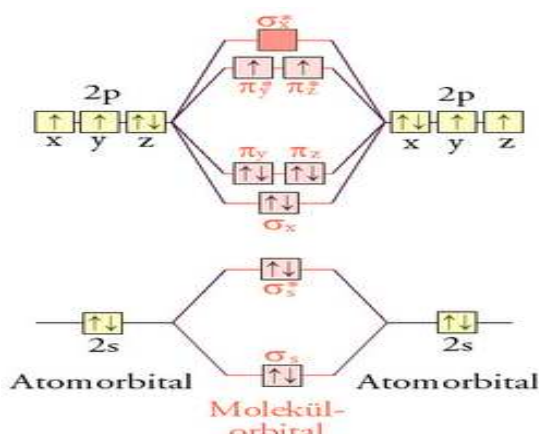
existem em Química? (RIBEIRO, 2014) Até que ponto as representações correspondem à realidade? (PESSOA JR, 2007). Para Ribeiro (2014), a diagramaticidade pode ser entendida como uma característica/estilo da práxis Química. Ribeiro (2014, p.248) ainda acrescenta:

Um diagrama tem as seguintes características: Simultaneidade: forma de exteriorização da mente humana, tais como mapas, esquemas, tabelas, diagramas; podem-se ver relações, proposições, conceitos; Espacialidade: é um espaço significativo; Hibridismo: trata de termos icônicos e linguísticos; Referencialidade: sempre tem um referente no mundo, são transcrições; Operatividade: tem também a finalidade de operar, guiar ações; Dependência: tem alguma dimensão tácita, depende do texto, do contexto onde está inscrito.

De acordo com Perini (2005, p.264): "[...] o papel referencial das relações espaciais é a característica fundamental das representações visuais." Como exemplo, a autora caracteriza um "diagrama de uma molécula" como um caso em que, "[...] as características espaciais de uma figura [...] referem-se a relações espaciais." Goodwin (2009b), ao comentar sobre a visão de Perini, diz que acha justo dizer, no entanto, que todas as formas de fórmulas estruturais são representações visuais e constituem mais exemplos do que diagrama, como chama Perini. Assim, argumenta que fórmulas estruturais são formadas a partir de símbolos dos elementos, pontos (que são usados para indicar os elétrons) e linhas retas entre os símbolos (para indicar as ligações químicas). Vários outros dispositivos são usados, por exemplo: linhas escuras e tracejadas são usadas para indicar a distribuição tridimensional dos átomos.

Woody (2000) admite que os diagramas são ferramentas valiosas de raciocínio para o químico, permitindo que vários aspectos da ligação química, energética e reatividade química, possam ser inferidos a partir dos diagramas (a estabilidade da ligação, geometria molecular, caminhos e reações, por exemplo). Lennard-Jones (1929) produziu uma das primeiras versões do diagrama para racionalizar o paramagnetismo da molécula de oxigênio. O diagrama mostra claramente dois elétrons desemparelhados resultantes da degeneração nos orbitais moleculares mais alto ocupados, conforme a Figura 1:

Figura 1 – Diagrama para molécula de O₂.



Fonte: http://es.wikipedia.org/wiki/Ox%C3%ADgeno_triplete

Ao comentar sobre a natureza dos diagramas, Woody (2000, p.624) afirma:

Representações visuais incorporados por diagramas orbitais destacam ou trazem à tona determinados aspectos da estrutura matemática da teoria quântica subjacente. As formas podem ser inferencialmente significativas porque a sobreposição de orbitais de elétrons adjacentes determina em grande parte a mudança, resultando em níveis de energia do sistema. Assim, as formas de orbitais moleculares são relativamente bons preditores da energética qualitativa da molécula.

Goodman (1976) caracteriza as condições gerais dos diagramas como componentes de sistemas de notação; por outro lado Giere (1999) considera diagramas como uma entre as diversas formas distintas de modelo de representação. Dialogando com Giere, Goodwin (2009b) acrescenta que as fórmulas estruturais parecem ter pelo menos dois papéis em Química Orgânica - como nomes descritivos (nesse sentido, a fórmula estrutural traz informações acerca da composição, conectividade e extensão limitada) e como modelos. O autor utiliza como exemplo a análise conformacional e as propriedades do 1,3 dimetil cicloexano para demonstrar como uma investigação sobre as propriedades de fórmulas estruturais (e/ou modelos físicos correspondentes) pode apoiar as conclusões sobre os compostos que se propõem a denotar. Para Goodwin (2009b), fórmulas estruturais em Química Orgânica, por exemplo, não expressam reivindicações; elas não são o tipo de coisas que podem ser consideradas como verdadeiras ou falsas por si mesmas. Contudo, o autor defende que fórmulas estruturais contribuem para o discurso da Química Orgânica.

De acordo com Woody (2000, p.617), um diagrama tem “[...] função comunicativa: químicos usam para visualizar, expressar suas metas de investigação, retoricamente para se comunicar entre pares e entre o público.” Um diagrama tem como característica: expressivo, representativo, operativo, explicativo, descritivo e heurístico (RIBEIRO, 2014). Justi (2006) comenta que o caráter diagramático da linguagem química revela a importância dos modelos na explicação química e da modelagem.

3.1.5 A importância da visualização via modelos

A Química é por natureza uma Ciência visual. A “[...] importância decrescente dos signos linguísticos, tais como nomes, em comparação com os signos icônicos como fórmulas estruturais, reforça o caráter intensamente visual da química” (SPECTOR, 2003, p219). Para Ribeiro (2014), a visualização é resultado de uma combinação analítica de estratégias visuais e não visuais, envolvendo imaginação espacial. Nesse sentido, algumas questões surgem: Qual é o papel das representações visuais na Química, em particular, na ligação química? Tais representações correspondem a algo na realidade?

De acordo com Goodwing (2009b), as representações visuais são capazes de desempenhar um papel "genuíno" nas explicações e argumentos da ciência, sem suportar o valor de verdade. Para ele, o argumento filosófico abstrato que motiva a abordagem das representações visuais, como portadores da verdade, é um equívoco. Hoffmann (2003) acrescenta que esse impulso para a visualização é proveniente do sucesso da maneira arquitetônica de pensar sobre a estrutura e construção em Química. Esse autor considera que a essência da comunicação arquitetônica consiste em moléculas com desenhos icônicos (ao invés de fotografias ou gravuras) e com modelos de esfera e de vara, que assumem seu valor. Para exemplificar, usa as ideias de Watson e Crick para demonstrar que esses autores não sintetizaram o DNA, porém fundamentaram a sua estrutura. De acordo com Hoffmann (2003, p.2):

A visualização através de modelos entra na química, como um corolário inevitável do macro / micro movimento que confusamente e produtivamente mistura na mente dos químicos modernos. Camadas de representação icônica e simbólica de moléculas mediam a nossa

luta para nos impulsionar em entender por que fora dessa solução azul vem um precipitado verde limão. Nós entendemos, não apenas por cogitação, mas através de desenhos de modelos moleculares e orbitais.

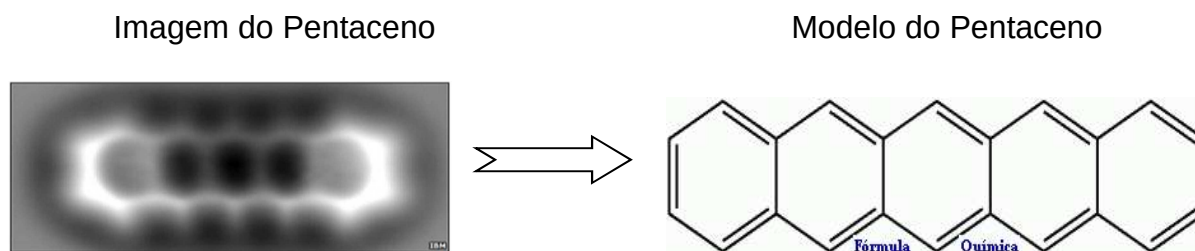
Embasado em Hoffmann, acreditamos que a analogia entre os modelos e as estruturas moleculares, por exemplo, pode facilitar o estudo da constituição, da configuração (ou seja, da estrutura tridimensional) e das diferentes conformações, as formas que uma molécula pode obter. Além disso, o uso de modelos moleculares é simples e de grande importância, pois apoia a visualização das ligações químicas. Há diversos casos em que a representação da estrutura tridimensional da molécula é fundamental.

Sobre a visualização de entidades químicas, Del Re (2000) considera que uma molécula não pode ser visualizada por ampliação simples por que é menor do que o comprimento de onda da luz visível; de maneira que o que denominamos de uma “imagem” obtida, por exemplo, por microscopia túnel, consiste em uma construção teórica baseada na similaridade formal entre ondas de matéria e ondas de luz. Para o autor, o homem não tem a percepção direta da grande maioria dos objetos que a ciência detecta no universo físico, de modo que seu conhecimento é baseado em analogias com objetos *ad hoc*, possivelmente artificiais, como, por exemplo, o modelo molecular de bolas e palitos (ou sua variante de bolas e molas).

De outro ponto de vista, Pessoa Jr. (2007, p.27), ao comentar sobre representações pictóricas em Química, alega que não está claro no que consiste o “aspecto visual” de átomos e moléculas, já que essas entidades são diminutas. Nesse sentido, problematiza a teoria quântica, questionando: O que a teoria quântica teria a dizer sobre isso? O que é um átomo na realidade, por trás dos traços luminosos e marcações de ponteiro que obtemos no laboratório? Para além das previsões feitas pela Física Quântica, o que ela nos diz sobre a melhor maneira de representar átomos e moléculas? Segundo esse autor, o significado das representações pictóricas vai depender de nossa postura interpretativa. Para ele, uma interpretação seria um conjunto de teses ou imagens que o físico agrega ao formalismo mínimo de uma teoria, sem afetar as previsões observacionais ou resultados da teoria (ou afetando de maneira não detectável). Por outro lado, Hanson (1958), “vê” que uma imagem seria um empreendimento carregado de teoria e, nesse sentido, haveria sempre um componente linguístico ou proposicional em

nossa visão. Assim, para esse autor, sem um componente linguístico, por exemplo, nada que tenhamos observado teria importância para a constituição do conhecimento. Assim, destacamos a seguir, por exemplo, a Figura 2:

Figura 2 - À esquerda, imagem obtida de um microscópio de força atômica e de varredura e a direita a representação da molécula do pentaceno ($C_{22}H_{14}$).



Fonte: http://www.iqsc.usp.br/cursos/quimicageral/quimica_geral.htm.

Comentando sobre a imagem do pentaceno, cabe chamar atenção que ela é obtida por um complexo processo de captura mediada por um instrumento, conforme aponta Del Re (2000). Sobre a representação da molécula do pentaceno, cabe discutir que é um modelo que tenta representar uma molécula, cuja realidade é muito mais complexa do que o modelo. É válido apontar também que a representação do pentaceno é resultado de inferências a partir do que é observado. Isto é conhecido como a “carga teórica de observação”, conforme explica Hanson (1958).

Diante do exposto, sustentamos que o modelo do pentaceno não é a realidade e nem deve ser, pois um modelo que busca ser a realidade; não é mais um modelo, mas uma descrição do real (GIERE, 1992, 1999; CHAMIZO, 2006).

3.1.6 Relação modelo, teoria e realidade

“Na química há uma supremacia da representação sobre a realidade” (BENSAUDE-VINCENT, 2009, p. 373). Para a autora, o químico não está interessado em representar a estrutura real das substâncias, seu objetivo é identificar disposições específicas para suas operações.

Nesse sentido, a teoria ou modelo que lhe interessa está apenas no seio da sua prática; o químico é um criativo, operador do real. Assim, defende que o debate

entre realismo/positivismo não é adequado na Química. Amparada por uma análise da história da Química, Bensaude-Vincent (2008) considera o debate entre positivismo ou realismo bastante inadequado para uma compreensão do estilo de pensamento químico, uma vez que os químicos não objetivam representar a estrutura da realidade material (RIBEIRO, 2014). Assim, para essa pesquisadora francesa, negações do estatuto ontológico de determinadas entidades químicas necessariamente não inserem a Química nos limites de uma ontologia positivista. Buscando caracterizar todo este complexo estilo de pensamento e fazer químico, Bensaude-Vincent (2008) entende ser bastante apropriado o termo realismo operacional ou operativo.

Os problemas acerca da representação aparecem tratados extensivamente ao longo da história da epistemologia (VAN FRAASSEN, 1980; SUPPE, 2000). Para Adúriz-Bravo (2001), um dos problemas mais antigos abordados pela epistemologia é o que remete à natureza do alcance da relação que existe entre o conhecimento científico e a realidade por ela representada. Nesse sentido, analisa a forma como modelos e teorias se conectam à realidade e como são julgadas pelos cientistas. Embasado em vários autores (HACKING, 1983; BUNGE, 1985; GIERE, 1992b; ROSENBERG, 2000), Adúriz-Bravo tem chamado atenção para a relação de correspondência entre realidade e representação, teoria e empiria e entre conhecimento e evidência.

De acordo com o autor, respostas clássicas à questão da correspondência entre teoria e empiria podem ser discutidas em duas grandes posições: por um lado, os realistas, por outro os antirrealistas, opostos a eles, destacando-se os instrumentalistas. A visão realista estabelece uma relação de correspondência mais ou menos biunívoca entre termos científicos e entidades do mundo natural. O problema do realismo, para dar conta da prática científica, requer uma análise rigorosa da relação entre teoria e fatos (ADÚRIZ-BRAVO, 2001).

Ribeiro (2014), concordando com Adúriz-Bravo (2001), ressalta que uma atitude realista crítica se associa à eficácia instrumental do instrumentalismo, à adequação empírica construtivista e concebe que as teorias científicas captam, parcialmente, a estrutura da realidade. Para Ribeiro (2014), o realismo crítico entende que as entidades são construções intelectuais e que tomam sentido no âmbito sociocultural em que surgem. Nesse sentido, Ribeiro (2014, p.143) comenta que “[...] o realismo crítico também é pragmático no sentido de que entende que os

modelos são explicações parciais, selecionadas com base em objetivos específicos de cada problema científico.”

Del Re (1998, 2000) argumenta que se aumentou a confiança acerca do que é observado a partir do desenvolvimento dos instrumentos de medição, ainda que tais observações sejam baseadas em inferências e analogias. Para ele, a maioria dos experimentos fornecem resultados que concordam com a suposição de que as moléculas, por exemplo, têm estruturas correspondentes a esses modelos. Também nessa mesma perspectiva, dialogando com Del Re, Laszlo (1998, 2000) defende que os instrumentos aumentaram a sensibilidade de medição, porém houve distanciamentos do real, sobretudo, no que diz respeito às percepções imediatas (cor, cheiro etc.) por entes microscópicos idealizados. Para o autor, a única realidade é o registro do espectro que envolve uma linguagem vinculada ao significado. Para Laszlo (1998, p.5):

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

Nesse contexto, os modelos moleculares têm semelhanças com o real postulado, misturando convenções com fatos e, nesse sentido, tem um papel operacional. De acordo com Laszlo, o laboratório de Química é o local onde se produz substâncias e novos conceitos. Por outro lado, Hoffmann (2007) acrescenta que a manipulação das transformações químicas ajuda a reforçar esse realismo do químico. Para esse autor, é difícil não acreditar que a estrutura de uma substância é a mesma de uma determinada forma se, a partir dela, for possível prever a formação de outra substância, realizar uma nova síntese e ter evidências experimentais de que a estrutura prevista foi alcançada.

Vihalemm (2011) argumenta que o realismo dos químicos não é o ingênuo, mas o prático. A prática científica acessa, por meio dos experimentos, o mundo real, sendo orientado por uma teoria científica, segundo normatizações. Nesse sentido, o que é “dado” com base na prática química, é um aspecto do real.

A posição instrumentalista supõe que as entidades teóricas são ferramentas de organização do mundo dos fenômenos que não necessariamente tem uma contrapartida na realidade ontológica (IZQUIERDO, 1999b; ADÚRIZ-BRAVO; MEINARDI, 2000). Para Chalmers (1984), a versão positivista lógica do realismo, frequentemente qualificada como ingênua, sustenta uma relação estrita entre representação e representante, ou seja, supõe que os termos teóricos da Ciência se referem a objetos do mundo. Essa visão teórica é problemática, conforme apontam vários autores, entre eles, Giere (1992b).

A solução atual para o problema da correspondência está adequadamente alinhada à recuperação do realismo para a qual tem sido propostas diversas variantes relativamente refinadas (BUNGE, 1985; PICKERING, 1989; GIERE, 1992b; UKLA, 1994; ROSENBERG, 2000). Essas variantes assumem algumas ferramentas conceituais do construcionismo, operacionalismo e do instrumentalismo, rivais tradicionais do modelo realista de correspondência (LOSEE, 1997). Assim:

Instrumentalismo e construtivismo, tem como característica comum a tese de que as teorias científicas são entidades criadas livremente pelos cientistas com grande independência da realidade a que se referem. Estas entidades são julgadas, no caso do instrumentalismo, por sua eficácia, ou resolução de problemas, como a predição e gestão de fenômenos. No caso do construtivismo, o juízo sobre as entidades teóricas tem como critério central que são capazes de dar conta de dados empíricos, e de organizar as experiências individuais (ADÚRIZ-BRAVO, 2001, p. 157-158).

Uma posição realista faz uma crítica adicional a essas características da eficácia experimental e da adequação empírica à ideia de que as teorias científicas capturam parte da estrutura profunda da realidade. Em outras palavras, “[...] as teorias são instrumentos para calcular e predizer, porém os cientistas têm a esperança de que também são descrições ou explicações da realidade” (HODSON, 1988, p.13).

Diante do exposto, nossa visão se aproxima do realismo crítico, o qual reconhece que as entidades da Ciência são criações do intelecto humano, porém as entidades operadas pelo intelecto têm restrições. Este realismo é também pragmático, no sentido que entende modelos científicos como explicações parciais da realidade, que capturam alguns de seus aspectos. Assim, o realismo científico pretende “[...] dar conta do caráter cultural, discursivo e, assim, convencional dos

modelos científicos, e de sua faculdade de se referir, embora parcial e cada vez mais, as entidades reais” (ADÚRIZ-BRAVO, 2001, p. 161).

3.1.7 Síntese da seção

Nesta seção, exploraram-se as concepções dos filósofos da Química com o intuito de entender a especificidade da linguagem química, especialmente a natureza da explicação química. Para tanto, utilizou-se o campo da representação e linguagem defendido por Adúriz-Bravo (2001).

As temáticas discutidas, modelos, leis e teorias, o problema da explicação estrutural, do reducionismo, da importância da diagramacidade, da visualização via modelos e da relação modelo, teoria e realidade, remetem à especificidade da linguagem química; à necessidade do uso ou não de referentes da Física (da Mecânica Quântica, em particular), para o entendimento da Química; questionam, por exemplo: Química é uma ciência autônoma ou não? São os modelos que estruturam as explicações e as práticas em química? (SCHUMMER, 1999, 2000) Existem ou não entidades propostas por termos tais como ligações químicas e orbitais? (LABARCA, 2010) A estrutura molecular é redutível ou irredutível? (LABARCA; BEJARANO; EICHERL, 2013) Até que ponto a Química é realista ingênua?

Na nossa compreensão, o problema do realismo está fortemente associado com o debate na Filosofia da Química, uma vez que tais perguntas convergem para a existência ou não de referentes teóricos na Química.

4 OS MODELOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA

Na seção 2, buscou-se conhecer o que pensam os filósofos da Ciência contemporânea sobre o que são modelos, bem como a relação entre modelo e teoria e as diferentes visões filosóficas que atribuem às teorias e, logo, aos modelos. Na seção 3, o objetivo foi entender os modos de explicação química, sua especificidade a partir de um dos seis campos estruturantes da epistemologia, defendido por Adúriz-Bravo (2001), a representação e a linguagem. Nesta seção, apresenta-se inicialmente o conceito de ligação química, e, em seguida, os modelos de Gilbert Newton Lewis, da Ligação de Valência e do Orbital Molecular.

4.1 O CONCEITO DE LIGAÇÃO QUÍMICA

O conceito de ligação química foi proposto na segunda metade do século XIX, num contexto em que se desejava a compreensão das sínteses de compostos orgânicos, bem como as estruturas das moléculas.

O termo ligação química foi proposto pela primeira vez por Butlerov (1828-1886), em 1861, associando sua ideia ao átomo, afinidade química para produção de fenômenos químicos, sendo que tal afinidade se reduzia, uma vez que, um composto químico era formado, conforme destacado a seguir:

A cada divisão elementar, diz ele referindo-se a um átomo, é dada uma certa quantidade de poder que produz fenômenos químicos (afinidade). Quando um composto químico é formado, parte desse poder ou sua quantidade total, é consumido (ligado, convertido numa nova forma) (BUTLEROV, 1953, p. 71 apud FAYERSHTEIN, 1980, p. 52, tradução nossa).

Ainda, em 1861, Butlerov, um dos primeiros defensores de uma abordagem estrutural da Química Orgânica, afirmou: "Só uma fórmula racional é possível para cada composto, e quando as leis gerais que regem a dependência das propriedades químicas sobre a estrutura química têm sido determinadas, esta fórmula expressar todas essas propriedades" (BROCK, 2000, p.256).

Outro teórico a se pronunciar sobre ligação química foi o inglês Edward Frankland, em 1866. Ele propôs que a ligação estava associada ao número de

vezes que um elemento se liga. Nesse sentido, sugeriu que tal noção estava relacionada a uma conexão de um átomo a outro, semelhante aos membros do sistema solar. Essa proposta traz um modelo para ligação química relacionada ao sistema solar, que no início do século XX, é retomada na ideia de átomo nos trabalhos de Thomson e Rutherford e, posteriormente, no de Bohr que apresenta estudos elaborados por Langmuir e Burry (MELO, 2002). Tais propostas foram realizadas em um contexto onde elétrons e prótons, por exemplo, não haviam sido detectados.

Durante o século XIX, a própria ideia de átomo foi considerada por grande parte da comunidade científica como uma hipótese fundamental para interpretar quantitativamente dados empíricos, mesmo existindo dúvidas e especulações sobre a realidade dos átomos que, em parte eram de natureza filosófica (OKI, 2009). Comentando sobre essa questão, em 1867, August Kekulé (1829 - 1896), expôs seu pensar químico alegando:

Eu não hesito em dizer que, de um ponto de vista filosófico, eu não acredito na existência real de átomos, tomando a palavra no seu significado literal de partículas indivisíveis de matéria. Eu prefiro esperar que nós possamos algum dia encontrar, para o que nós agora chamamos átomos, uma explicação mecânico-matemática para o peso atômico, a atomicidade e numerosas outras propriedades dos chamados átomos. Como químico, porém, eu recomendo a suposição de átomos, não apenas como recomendável, mas como absolutamente necessária à química (KEKULÉ, 1867 apud MIERZECKI, 1991, p.129).

No final do século XIX, a maior parte dos químicos acreditava que a matéria era formada por átomos e que estes se combinavam para formar moléculas. A crença também estava alicerçada na perspectiva de que as moléculas tinham uma estrutura definida no espaço tridimensional e que a forma de ligação entre átomos era um fator determinante para sua reatividade química. Um exemplo notório, do que foi realizado utilizando essas ideias como base foi a determinação da configuração espacial de isômeros de carboidratos por Fisher. Um ponto que chama a atenção é que até o final daquele século, permanecia uma relativa independência entre a Física e a Química.

No início do século XX, os físicos estavam começando a desvendar a estrutura do átomo e buscaram relacionar sua estrutura eletrônica para entender ligação química e valência. A valência foi um conceito formulado entre 1860 e 1870,

atribuído aos trabalhos do alemão Kekulé, associado ao poder de combinação dos elementos. Atualmente, ela está relacionada com os elétrons que participam da ligação química, geralmente da última camada, e quando envolve elemento de transição, também da penúltima ou antepenúltima camada (PENHA, 2005).

Em 1904, Thomson propôs, com base em seu modelo, que a ligação química era formada quando um átomo doava um ou mais elétrons para outro átomo, produzindo nesse processo partículas carregadas positivamente (denominadas cátions) e carregadas negativamente (denominadas ânions) (BROCK, 2000).

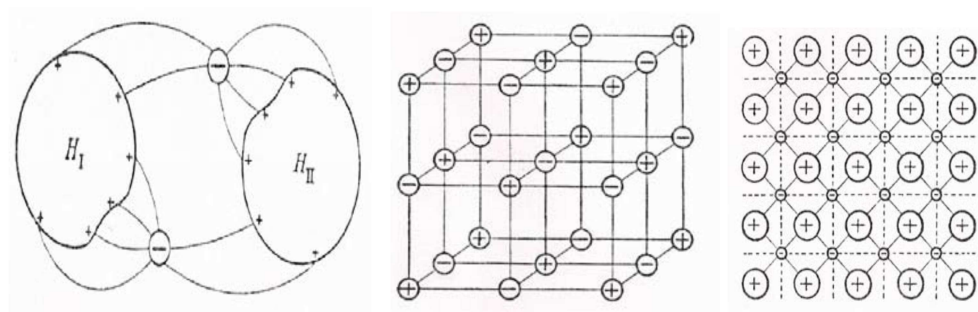
Ainda, em 1904, o químico alemão Richard Abegg, ao seguir a periodicidade proposta por Mendeleev, reconheceu a estabilidade do grupo de oito elétrons, publicando o artigo intitulado "*Valence and the periodic system: attempt at a theory of molecular compounds*" (*Valência e o sistema periódico: tentativa para uma teoria de compostos moleculares*), sobre o qual Lewis (1966, p. 30) propôs:

A soma 8 de nossas normal e contra-valências, contudo, possui significado simples como o número que para todos os átomos representa os pontos de ataque de elétrons e o número do grupo ou valência positiva indica quantos dos 8 pontos de ataque deve manter os elétrons em condição para fazer o elemento eletricamente neutro.

Assim, uma vez desprezados os sinais referentes às cargas dos elementos, a soma será igual 8, conforme o exemplo a seguir: no KBr, a valência do Br é -1, porém no HBrO₄, Br é -7.

Em 1908, o físico alemão Johannes Stark propôs a ideia de compartilhamento, envolvendo diferentes átomos. Segundo o físico, o elétron no átomo enviava linhas de força para a parte positiva do próprio átomo, bem como para outro átomo. Em seguida, admitiu que o elétron se movia entre os átomos e isso era equivalente à ligação química (LEWIS, 1966). Assim, em 1915, independente de Lewis, propôs a Figura 3 a seguir:

Figura 3 - Da esquerda para a direita: representação de Stark, em 1915, do par de elétrons compartilhado na ligação em H_2 , em seguida, a ligação iônica em NaCl e a estrutura rígida de um metal formada por íons positivos e elétrons livres.



Fonte: Jensen (2009, p. 278-79)

Com a representação de Stark, três modelos explicativos são propostos: ligação covalente (para a molécula de H_2), ligação iônica (para o composto NaCl) e ligação metálica (para estrutura de um metal). A ligação em H_2 forma uma estrutura discreta (a molécula); as ligações em NaCl e no metal, formam estruturas não discretas, ou seja, agregados de cátions e ânions e de cátions e elétrons deslocalizados, respectivamente.

Na próxima seção, procura-se explorar a natureza da ligação covalente, iniciando com a perspectiva teórica de Lewis.

4.1.1 O modelo de Lewis para a ligação covalente

O químico americano Gilbert Newton Lewis (1875-1946), desenvolveu seu modelo anos antes do surgimento da Mecânica Quântica e do conceito de orbital. Em 1902, em Harvard, enquanto explicava aos seus alunos as leis da valência, Lewis admitiu os átomos formados de uma série concêntrica de cubos com elétrons, distribuídos em cada um dos oito vértices. Assim, propôs o chamado “átomo cúbico”, mas não publicou. De acordo com Gugliotti (2001, p.2), “Lewis imaginava um átomo estático, com os elétrons arranjados em camadas cúbicas em torno do núcleo.”

Figura 4 - Gilbert Newton Lewis em seu laboratório na Universidade da Califórnia, em Berkeley.

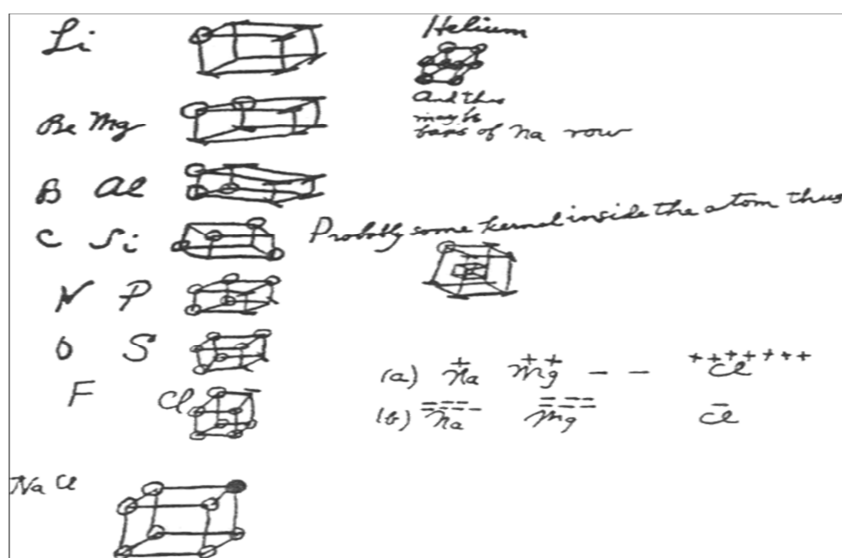


Fonte:

http://lqes.iqm.unicamp.br/canal_cientifico/lqes_cultural_ano_intern_Gilbert_Lewis.html

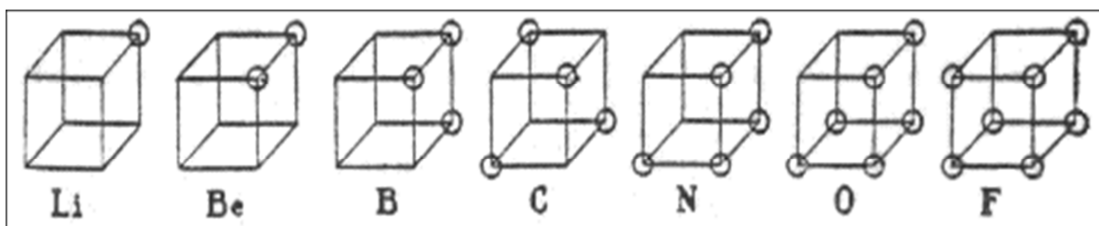
Em 1916, Lewis publicou um trabalho intitulado *The atom and the molecule*, onde buscava explicar a valência e onde fez uma descrição da sua ideia de estrutura atômica (“átomo cúbico” – Figuras 5 e 6). Assim, os círculos representam os elétrons na camada externa, conforme se vê, a seguir:

Figura 5 - A ideia do “átomo cúbico”. Manuscrito de Lewis, de 28 de março de 1902.



Fonte: <http://www.chemheritage.org/discover/online-resources/chemistry-in-history/themes/molecular-synthesis-structure-and-bonding/lewis.aspx>.

Figura 6 - Reprodução da figura dos “átomos cúbicos” de Lewis publicada em 1916.



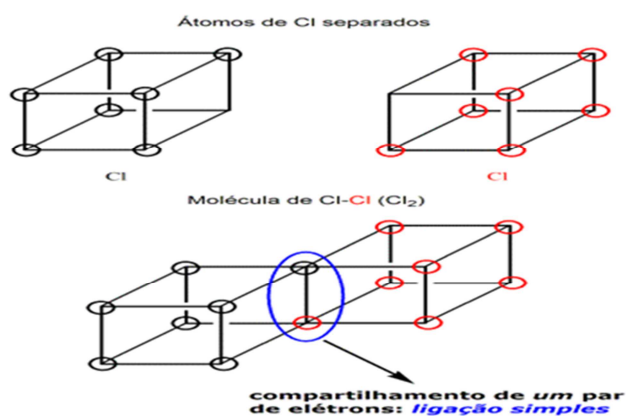
Fonte: Lewis (1916).

Lewis acreditava na existência de uma única causa fundamental para as diversas combinações químicas. Assim, ele propôs três ideias fundamentais para a explicação da ligação química: os elétrons da camada de valência são normalmente encontrados em pares; uma ligação covalente pode ser representada por um par de elétrons compartilhados entre dois átomos ligados; e quatro pares de elétrons constituem uma camada de valência estável. Segundo o químico, as ligações eram causadas pela capacidade dos elementos de formar seu grupo de oito elétrons na camada eletrônica mais externa. Irving Langmuir, químico e físico norte-americano, entusiasta das suas ideias, encarregou-se de sua divulgação, propondo alguns acréscimos, o qual rebatizou, mudando de a regra dos oito para a regra do octeto (nome ainda utilizado). Assim:

Lewis acreditava que o “fenômeno fundamental” numa ligação química era o emparelhamento de elétrons e isto se manifestava pelo número par de elétrons na camada de valência para a maioria dos compostos conhecidos (por exemplo: H_2 , 2 elétrons; H_2O , 8 elétrons; etc.) (DAVANZO; CHAGAS, 1993, p.153).

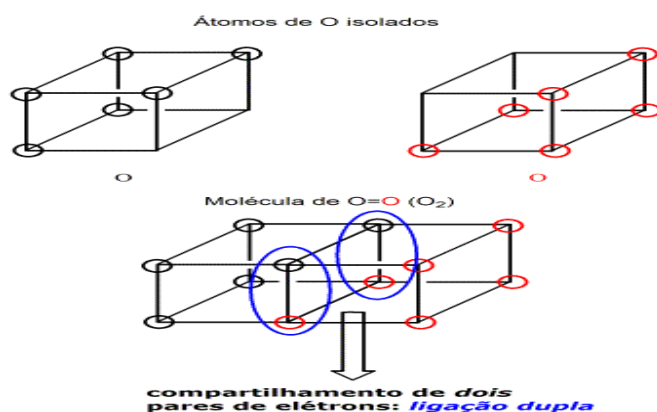
Lewis sugeriu outra explicação para estabilidade dos átomos, o compartilhamento de elétrons, algo proposto de outros modos por Thomson e Stark. Para exemplificar, têm-se as Figuras 7 e 8:

Figura 7 – Reprodução da estrutura química proposta por Lewis (1916) para o gás Cl_2 . Apenas os elétrons de valência estão sendo mostrados.



Fonte: <http://200.156.70.12/sme/cursos/EQU/EQ20/modulo1/aula0/aula02/03.html>

Figura 8 – Reprodução da estrutura química proposta por Lewis (1916) para a molécula de O_2 . Apenas os elétrons de valência estão sendo mostrados.



Fonte: <http://200.156.70.12/sme/cursos/EQU/EQ20/modulo1/aula0/aula02/03.html>.

Ainda em 1916, supôs que a camada mais externa dos gases nobres possuía oito elétrons e que, em relação aos outros átomos, havia uma tendência a completar oito elétrons de dois modos: através da perda ou do ganho de elétrons externos, formando cátions (íons positivos) e ânions (íons negativos), conforme ocorre na ligação iônica, ou pelo compartilhamento de pares de elétrons com outros átomos. Para Lewis, a ligação covalente resultava do compartilhamento de pares de elétrons entre os átomos.

Para explicar a ligação entre dois átomos de não-metais, como, por

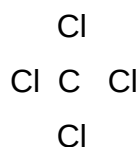
exemplo, as espécies diatômicas F_2 , Cl_2 , Br_2 e I_2 , Atkins e Jones (2006, p.170) apontam que a proposta de Lewis é que “[...] os átomos de não-metais compartilham elétrons até que cada um deles complete o octeto.” Para Lewis, os elétrons interagem com os dois núcleos. Em outras palavras, os dois átomos ficam unidos por que há interação coulômbica entre os dois elétrons e os núcleos; nenhum dos dois átomos envolvidos perde totalmente um elétron.

Ainda, desenvolveu uma forma de descrever as ligações covalentes utilizando um método de colocar os elétrons em átomos, íons e moléculas. Esse método faz uso de diagramas, atualmente denominados de estruturas de Lewis. As estruturas de Lewis não retratam as formas das moléculas: elas simplesmente representam que átomos se ligam por seus símbolos químicos, as ligações covalentes por linhas (-) representam os pares de elétrons compartilhados e quais átomos têm pares de elétrons isolados. Deste modo, quando um par de elétrons é compartilhado é chamado de ligação simples. Quando dois pares de elétrons são compartilhados entre dois átomos, tem-se uma ligação dupla. Quando três pares de elétrons são compartilhados formam uma ligação tripla.

Assim, para se chegar à representação de uma estrutura de Lewis, podem-se utilizar, de acordo com Brady e Humiston (1986, p.129-130), os seguintes procedimentos:

1. Conte todos os elétrons de valência dos átomos. No caso de ser um íon, acrescente um elétron adicional para a carga negativa ou subtraia um elétron para cada carga positiva.
2. Coloque um par de elétrons em cada ligação.
3. Complete os octetos dos átomos ligados ao átomo central. (Lembre-se, porém, que a camada de valência de cada átomo de hidrogênio é completa com apenas dois elétrons).
4. Coloque todos os elétrons adicionais no átomo central, em pares.
5. Se o átomo central ainda tiver menos que um octeto, você deve formar ligações múltiplas para que cada átomo possua um octeto.

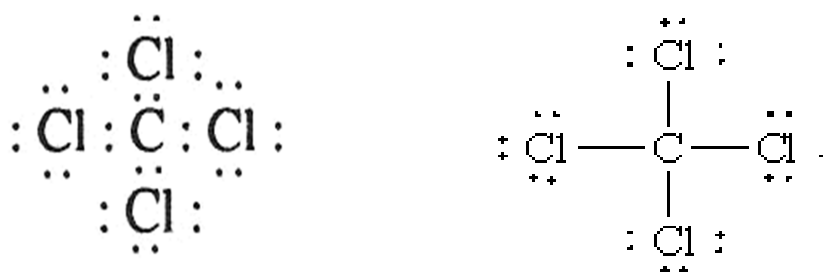
Para ilustrar como os procedimentos funcionam, propõe-se, como exemplo, a estrutura de Lewis para o CCl_4 (tetracloreto de carbono). Em um primeiro momento, precisa-se do arranjo dos átomos. Então, a fórmula sugere o arranjo a seguir:

Figura 9 – Arranjo dos átomos para a molécula de CCl_4 .

Fonte: Brady e Humiston (1986).

Em um segundo momento, contam-se os elétrons de valência. O Carbono (que pertence ao Grupo IVA da Tabela Periódica) contribui com 4 elétrons, já o Cloro (que pertence ao Grupo VIIA da Tabela Periódica) contribui com 7 elétrons, cada um formando um total de 32 elétrons (ou seja, $4e^- + 28e^-$).

Em um terceiro momento, inicia-se a distribuição dos elétrons em cada ligação, de maneira que só possui 8 elétrons, restando apenas 24 elétrons. A seguir, completaram-se, no quarto momento, as camadas de valência dos átomos de Cl, conforme ilustra a Figura 10 abaixo:

Figura 10 – Da esquerda para direita: representação da estrutura de Lewis para a molécula do tetracloreto de carbono, CCl_4 .

Fonte: Brady e Humiston (1986).

Por fim, chega-se à estrutura de Lewis para o Cl_4 . Essa estrutura mostra como os 8 elétrons de valência são usados formando o tetracloreto de carbono. Nota-se, portanto, que cada átomo possui um octeto. Russell (1994, p.346) ressalta que “[...] a regra do octeto estabelece que, com exceção do hélio, os átomos dos gases nobres possuem uma camada de valência especialmente estável, ns^2p^6 , ou seja, um octeto.”

Em 1923, ele publicou um livro intitulado: *Valence and the structure of atoms and molecules*, onde faz uma revisão sobre suas próprias ideias acerca da estrutura

atômica, o que o leva a estabelecer um construto mais sólido para seu modelo. É nessa obra que Lewis reforçou a importância do par eletrônico na formação da ligação química como algo mais fundamental do que propusera em 1916. Nesse trabalho, apontou a existência de compostos formados por 2, 6, 8 e 10 elétrons na camada de valência, porém esses números, segundo ele, eram consequência do compartilhamento do par de elétrons. Nessa perspectiva, Lewis discordava das ideias de Langmuir que defendia a tese do octeto.

Ainda em 1923, Lewis construiu a sua ideia de ligação química, considerando alguns resultados publicados, sobretudo, por Langmuir (1919) e Bohr (1913 e 1921) acerca da estrutura dos átomos. Com isso, abandonou sua ideia de “átomo cúbico” e passou a utilizar a ideia de camadas eletrônicas de acordo com o modelo de Bohr. Porém, o modelo de Lewis tem diversas dificuldades explicativas, conforme destacamos a seguir:

Seu modelo é incapaz de explicar a importância dos pares de elétrons na formação da ligação covalente. Lewis, não entendia por que os elétrons em moléculas pareciam ser encontrados em pares, os quais não pareciam ser consistentes com a repulsão eletrostática entre os elétrons.

- Ele trata todas as ligações covalentes da mesma maneira, com base fundamental no emparelhamento de elétrons e “[...] não explica que as ligações covalentes podem diferir uma das outras.” Por exemplo, a diferença entre H – H (74pm; 436,4KJ /mol) e F – F (142pm; 150,6 KJ/mol). Dessa forma, esse modelo não justifica as diferenças nos comprimentos de ligação e nas energias de dissociação. Ainda “[...] ignora as mudanças energéticas que ocorrem durante o processo de formação de ligações” (CHANG, 1994, p.428).
- Não consegue explicar de forma quantitativa as diferenças em distâncias e energias de ligações simples, duplas e triplas.
- Seu modelo não permite calcular estados excitados e espectro molecular.
- O modelo não considera as energias envolvidas na ligação química. Assim, Lewis é útil na descrição qualitativa das ligações químicas, porém, quando se busca discutir questões de ordem energética, torna-se necessária a utilização das perspectivas quânticas que propõem a ligação química com base na combinação de orbitais.
- Lewis não explica o paramagnetismo da molécula de O₂. De acordo com

sua descrição ligação de O_2 deveria assumir uma estrutura com todos os elétrons emparelhados. No entanto, o oxigênio é uma substância paramagnética (ou seja, o paramagnetismo é uma propriedade de elétrons desemparelhados).

- Seu modelo também falha na descrição de compostos deficientes em elétrons. Por exemplo, o composto diborano, B_2H_6 , gás incolor que se inflama com facilidade em contato com o ar. O problema é que o diborano tem 12 elétrons de valência (sendo que 3 de cada átomo de B e 1 de cada átomo H), mas para uma estrutura de Lewis seriam necessárias 7 ligações, ou seja, 14 elétrons, para ligar os 8 átomos. Dessa forma, o diborano é um exemplo de compostos deficientes em elétrons, ou seja, um composto com menos elétrons de valência do que a quantidade necessária para sua representação da estrutura válida de Lewis.

Apesar das dificuldades explicativas, Lewis tem sua importância no contexto histórico. Atkins e Jones apontam que, na realidade, os modelos modernos de ligação “[...] mostram que Lewis se aproximou da descrição correta e confirmam, com poucos ajustes, que seus conceitos ainda podem ser utilizados” (2006, p.218), assim, como o são até hoje nos cursos superiores de Química, inclusive.

4.1.2 O modelo da ligação de valência

A capacidade explicativa da Química aumentou ainda mais a partir de 1927, com a denominada Mecânica Quântica (PESSOA JR, 2007). Com o surgimento dessa teoria, muitos cientistas acreditavam que a Física poderia explicar a Química na sua totalidade - apenas uma questão de tempo e de cálculos computacionais, conforme Dirac (1929, p.714) aponta:

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.

A postulação do estudo de um sistema microscópico consiste em encontrar a função de onda Ψ , a qual satisfaz a equação de Schrödinger. Nesse sentido, a Mecânica Quântica serviu de base para descrever, explicar e prever o comportamento da matéria nos níveis atômico e molecular.

Há dois modelos importantes da ligação química baseadas na Mecânica Quântica: o denominado Modelo da Ligação de Valência e o Modelo do Orbital Molecular. De acordo com o modelo da ligação de valência, as ligações covalentes se formam quando os orbitais nos átomos se superpõem. O Modelo dos Orbitais Moleculares supõe que os elétrons ocupam orbitais denominados orbitais moleculares. Nesse sentido, elétrons que ocupam esses orbitais moleculares não pertencem a nenhum átomo, mas à molécula como um todo, conforme veremos na seção a seguir.

O Modelo da Ligação de Valência surgiu de um artigo publicado por Walter Heitler e Fritz London em 1927. Sua abordagem foi desenvolvida por Slater (1929) e mais extensamente por Linus Pauling (1931). Segundo Woody (2000), Heitler e London apresentaram um modelo da Mecânica Quântica para a molécula de hidrogênio, que previu a estabilização energética significativa o suficiente para dar conta qualitativamente do vínculo diatômico. Quanto ao aspecto quantitativo, seus tratamentos representaram 67% da energia de ligação experimental. Nesse sentido:

O cálculo Heitler-Londos foi suficiente para prever a existência de uma ligação covalente estável e a base conceitual das técnicas matemáticas utilizadas facilitou uma "explicação" geral desta ligação ao mesmo tempo proporcionou orientações para o tratamento de outras moléculas (WOODY, 2000, p.615).

Aqui, tem-se na primeira aplicação da Mecânica Quântica a um sistema molecular, nesse caso para molécula de H_2 . Buscou-se, à época, realizar a descrição da ligação covalente a partir da Mecânica Quântica. A generalização de moléculas poliatômicas (3 ou mais átomos) ocorreu por meio dos trabalhos de John C. Slater (1930), do Prêmio Nobel Linus Pauling (1931, 1939), de Henry Eyring e Michael Polanyi (1931) e de George Willard Wheland (1955). A TLV é a primeira descrição da ligação covalente em termos de orbitais atômicos, uma forma aproximada para resolver a equação de Schrödinger. Para Brady e Humiston (1986, p.163), o modelo supõe que:

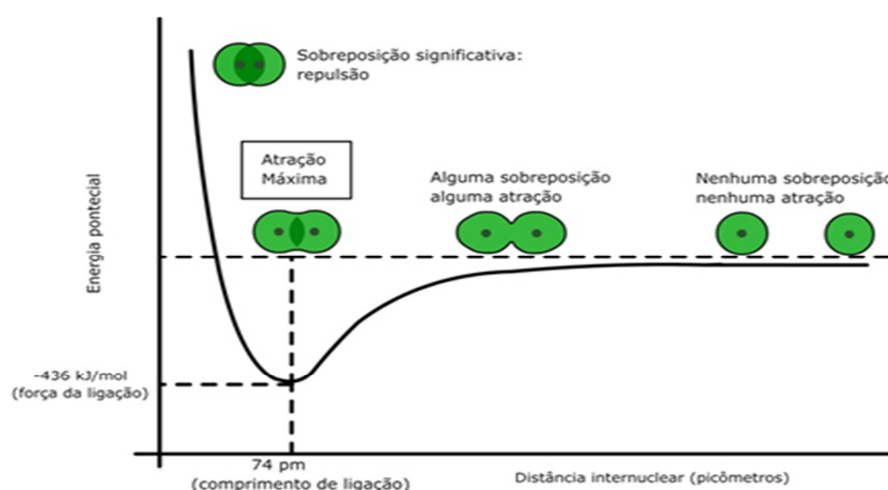
Quando dois átomos se aproximam para formar a ligação covalente, um orbital atômico de um átomo superpõe-se com um orbital atômico do outro. Esta superposição significa que dois orbitais partilham de uma mesma região no espaço. O par de elétrons que associamos com uma ligação covalente é partilhado entre os dois átomos nesta região de superposição e a força da ligação covalente, medida como a quantidade de energia necessária para quebrá-la, é proporcional à extensão da sobreposição dos orbitais. Como uma consequência, os átomos numa molécula tendem a se posicionar de forma a maximizar a superposição do orbital.

Neste modelo, a molécula é concebida com um agregado de átomos. Assim como alega Pauling (1965, p.4) “[...] podemos dizer que há uma união química entre dois ou mais átomos quando as forças que atuam entre eles são tais que levam à formação de um agregado com suficiente estabilidade para considerá-lo como uma espécie molecular independente.” Essa concepção qualitativa de molécula é a mesma desenvolvida pela Química clássica antes da aplicação da Mecânica Quântica para sistemas moleculares.

As ligações covalentes são formadas pela sobreposição de orbitais atômicos. Assim, por causa dessa sobreposição, embora não possamos determinar com precisão a localização de um elétron com base nos princípios da dualidade onda-partícula, os elétrons de ligação têm uma maior probabilidade de serem encontrados dentro de uma região do espaço influenciada por ambos os núcleos.

Mas, o que acontece, contudo, se dois átomos de hidrogênio a uma distância infinita forem aproximados para formar uma ligação? A Figura 11 a seguir, ilustra a variação da sobreposição de orbitais para molécula de H_2 :

Figura 11 - Variação da energia potencial durante a formação da ligação H - H a partir de átomos de hidrogênio isolados. A energia mais baixa é atingida com uma separação H - H de 74 pm, em que a sobreposição dos orbitais 1s ocorre. As distâncias maiores a sobreposição é menor, e as ligações são mais fracas. As distâncias H - H menores que 74 pm, as repulsões entre os núcleos e entre elétrons dos átomos aumentam rapidamente, e a curva da energia potencial sobe de modo íngreme. Assim, espera-se que uma molécula H_2 seja menos estável quando a distância entre os átomos é muito pequena.



Fonte: Brown e colaboradores (2005).

A curva descreve a situação quando os dois orbitais 1s dos átomos de H se aproximam. Os elétrons que compõem o par compartilhado entre átomos adjacentes obedecem ao *Princípio de exclusão de Pauli*, isto é, estão emparelhados, tendo *spins* opostos. De acordo com o modelo da ligação de valência, um par de elétrons pode simultaneamente ocupar os orbitais de dois átomos somente se existir significativa sobreposição no espaço, assim como ocorre na formação da molécula de H_2 ilustrada na Figura 11. Nesse sentido, Russell (1994, p.928) destaca:

A sobreposição no orbital produz uma região em que a densidade de probabilidade eletrônica está diretamente entre os núcleos e em que a região de sobreposição é simétrica ao redor do eixo de ligação, por que cada orbital 1s é esférico.

Vale ressaltar, sobre a Figura 11, que os cálculos apontam que, quando a distância entre os átomos de hidrogênio é igual a 74 picômetro, a energia potencial atinge um mínimo e a molécula de H_2 é mais estável. De forma significativa, 74 pm

corresponde à distância de ligação experimental para a molécula de H₂.

A ligação covalente que se origina da sobreposição de dois orbitais, um de cada átomo como, no caso do H₂, é chamada de ligação sigma (σ). Segundo Russell (1994), quando é formada a molécula do hidrogênio a nuvem eletrônica de cada um dos átomos se dilata, formando um volume maior. Isso aumenta significativamente a estabilidade do sistema. Russell (1994, p.929) ressalta que “[...] a mecânica quântica mostra que a dilatação de uma distribuição de densidade de probabilidade eletrônica abaixa a energia do elétron.” Para a LV, cada átomo H tem sua própria região de orbitais. A seguir, a função de onda para a molécula de hidrogênio:

$$\Psi_{(LV)} = \Psi_{A(1)B(2)} + \Psi_{A(2)B(1)}$$

De acordo com a equação, os elétrons são representados por 1 e 2, e A e B representam átomos de hidrogênio. Um tipo diferente de ligação aparece na molécula de nitrogênio N₂. A distribuição dos elétrons em seu orbital é 1s² 2s² 2p³, significa que há um elétron em cada um dos três orbitais 2p. Quando os elétrons no orbital p em cada par de átomos se encontram, os orbitais podem sobrepor-se, resultando em um tipo de ligação π (pi).

Convém destacar que outro conceito importante é o de hibridização introduzido por Pauling. Para Chang (1994, p.430):

Utilizamos o conceito de hibridização para descrever a formação de ligações químicas apenas quando o arranjo dos pares de electrões no espaço foi previsto através do modelo RPECV. Se o modelo RPECV previr um arranjo tetraédrico dos pares de electrões, admitimos que se formaram orbitais híbridas sp³ a partir de uma orbital s e de três orbitais p.

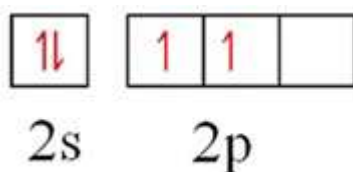
Figura 12 - Linus Carl Pauling (1901–1994).



Fonte: <http://www.lqbo.ufscar.br/wp-content/uploads/2013/08/Aula-2-QO-I-marco.pdf>.

A simples visão da superposição de orbitais atômicos semipreenchidos até o momento, não pôde ser utilizada para justificar todas as estruturas moleculares. Esse modelo funciona bem para moléculas como H_2 e HF , porém quando se trata de moléculas poliatômicas, como o metano, CH_4 , por exemplo, ela falha, pois não consegue explicar nem prever seus ângulos de ligação. No caso do carbono, podemos desconsiderar o orbital $1s$ na contribuição da ligação covalente, uma vez que os dois elétrons são ligados fortemente ao núcleo que não há possibilidade de sobreposição significativa com este orbital. Conforme destacado na Figura 13, poderíamos esperar inicialmente a formação de apenas duas ligações com o hidrogênio, de maneira que a camada de valência do carbono possui apenas dois elétrons desemparelhados para o compartilhamento, conforme ilustrado a seguir:

Figura 13 – Configuração eletrônica do carbono no estado fundamental.



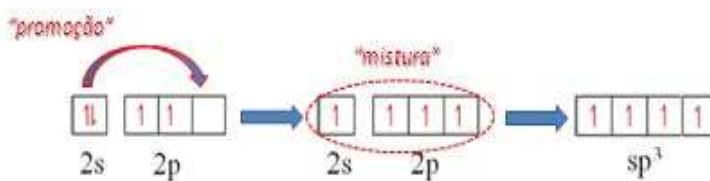
Fonte: <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?p=565>

Embora a espécie CH_2 , já tenha sido detectada, é tão reativa que tem vida curta e não existe como uma molécula estável. Porém, a substância mais simples formada por carbono e hidrogênio é o metano, CH_4 . Mas, como explicar isso? Para acabar com esse problema, Pauling introduziu a hibridização. Segundo esse autor, a hibridização diz que os orbitais puros podem se fundir para formar novos orbitais, os orbitais híbridos, menos energéticos e, portanto, mais estáveis. Costuma-se dizer também que a hibridização leva a uma mistura de orbitais puros para gerar novos orbitais. No caso do metano, essa mistura inclui um orbital s e três orbitais p , denominando-se comumente de hibridização sp^3 . Nesse sentido, a mistura entre o orbital $2s$ e os três orbitais $2p$ produz quatro orbitais híbridos sp^3 . As contribuições dos caracteres s e p ao orbital híbrido são de 25% de caráter s e 75% de caráter p , respectivamente. Assim, para explicar a estrutura dessa molécula pela separação dos elétrons, Brady e Humiston (1986, p.165) sugerem que:

Três das ligações C-H serão formadas pelo enlace de orbital 1s do hidrogênio com orbitais 2p do carbono, enquanto que a ligação restante seria resultado do enlace do orbital 2s do carbono com um orbital 1s do hidrogênio. Esta quarta ligação C-H seria, certamente, diferente das outras três, por que é formada por orbitais diferentes. Experimentalmente, tem sido encontrado, contudo, que todas as quatro ligações C-H são idênticas e que a molécula tem uma estrutura na qual os átomos de carbono situam-se no centro de um tetraedro, com os átomos de hidrogênios localizados nos quatros vértice.

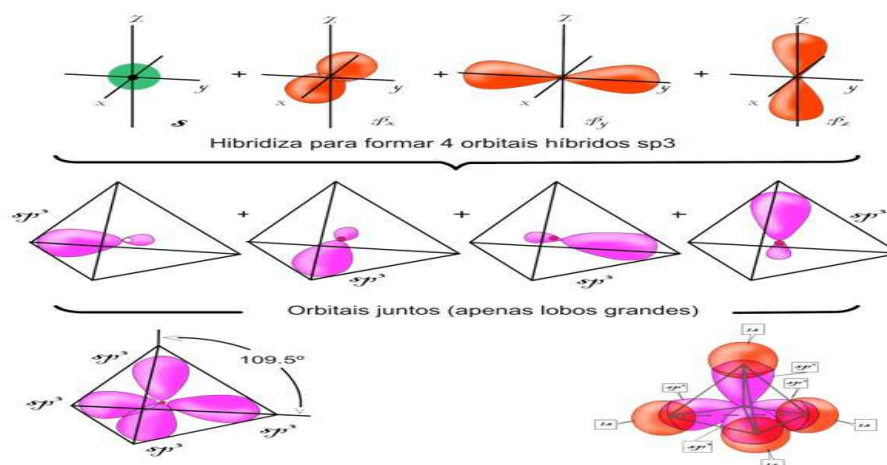
Vale destacar, que cada ligação C-H tem uma energia de 438 kJ/mol e comprimento de 110 pm, sendo que cada H–C–H possui ângulos de ligação de aproximadamente $109,5^\circ$, o ângulo tetraédrico. Desse modo, para o caso do CH_4 , tem-se as Figuras 14 e 15:

Figura 14 - Hibridação dos orbitais do carbono no metano.



Fonte: <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?p=565>

Figura 15 – Orbitais híbridos sp^3 . Os lobos voltados em direção aos vértices de um tetraedro.



Fonte: <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?p=565>.

Aparentemente, os orbitais que o carbono disponibiliza para formação de ligações nas moléculas (conforme ocorre no metano, CH_4) não são os orbitais atômicos puros e simples. Mas, quais são esses orbitais? De acordo com Brady e Humiston, a solução para essa questão é encontrada no arcabouço matemático da Mecânica Quântica. De acordo com Brady e Humiston (1986, p.166) “[...] a solução da equação de onda de Schrodinger consiste em uma série de funções de onda, Ψ , cada uma das quais descrevendo um orbital atômico diferente.” Sendo assim, é característico dessas funções matemáticas que, quando elevadas ao quadrado, permitem calcular a probabilidade de encontrar um elétron ao redor do núcleo. Desse modo, esferas e diagramas correspondem, aproximadamente, às representações ilustradas, previstas pelas funções de onda para orbitais s e p. Assim, é possível combinar estas funções, realizando a soma e subtração, dando origem a novas funções, chamadas de orbitais híbridos.

Segundo Pauling (1928, 1931) e Slater (1931), a natureza da ligação química observada no CH_4 pode explicar-se supondo que os orbitais híbridos podem ser formados pelas combinações lineares entre os orbitais s e p. Para Gillespie (2004), não é demais enfatizar que a hibridização não é um fenômeno físico, mas matemático, que nos permite assegurar que uma ligação via Modelo da Ligação de Valência pode ser descrita em termos da sobreposição de um único orbital de um átomo com um único orbital do outro átomo. Esse autor, ainda ressalta que a hibridação não produz qualquer alteração na densidade de elétrons de um átomo isolado, que é sempre esférico. Ou seja, uma mudança na densidade de elétrons ocorre somente com a formação da ligação e uma concentração correspondente de carga eletrônica nas regiões de ligação.

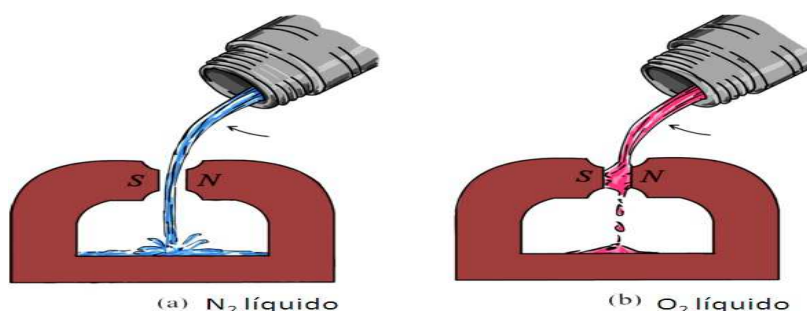
Portanto, verifica-se, em geral, que o Modelo da Ligação de Valência não prevê a forma molecular, mas apenas fornece um método para descrever a ligação em termos da sobreposição de dois orbitais adequados quando a geometria é conhecida. Esse modelo, assim como o modelo de Lewis, tem limitações, pois ele é incapaz de prever e explicar propriedades de algumas moléculas, por exemplo, o paramagnetismo do oxigênio.

4.1.3 O modelo do orbital molecular

O Modelo dos Orbitais Moleculares foi introduzido pelo químico Robert Mulliken (1928) e Friedrich Hund, com contribuições de outros autores. Esse modelo, segundo Atkins e Jones (2006, p.217), “[...] resolve todas as deficiências do modelo de Lewis, sendo mais fácil de usar nos cálculos do que o Modelo da Ligação de Valência.” Acrescentando a isso, ele pode explicar compostos deficientes em elétrons (diborano, por exemplo), os espectros eletrônicos das moléculas, estabilidade das espécies de H_2^+ e o paramagnetismo do oxigênio.

Um dos maiores triunfos do Modelo do Orbital Molecular foi a sua capacidade de demonstrar que a molécula de O_2 é paramagnética; quando submetida à ação de um campo magnético externo, ela é atraída em direção ao campo, conforme ilustramos a seguir:

Figura 16 – Paramagnetismo do oxigênio.



Fonte: http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?attachment_id=603.

Este é o grande contraste com o Modelo da Ligação de Valência, que leva à estrutura de Lewis ($:\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}:$) e não explica o paramagnetismo da molécula de O_2 . Para Russell (1994, p.948), o Modelo do Orbital Molecular supõe que:

Os orbitais atômicos, AOs, da camada de valência, deixam de existir quando a molécula se forma, sendo substituídos por um novo conjunto de níveis energéticos que correspondem a novas distribuições da nuvem eletrônica (densidade de probabilidade). Esses novos níveis energéticos constituem uma propriedade da molécula como um todo e são chamados, consequentemente, orbitais moleculares.

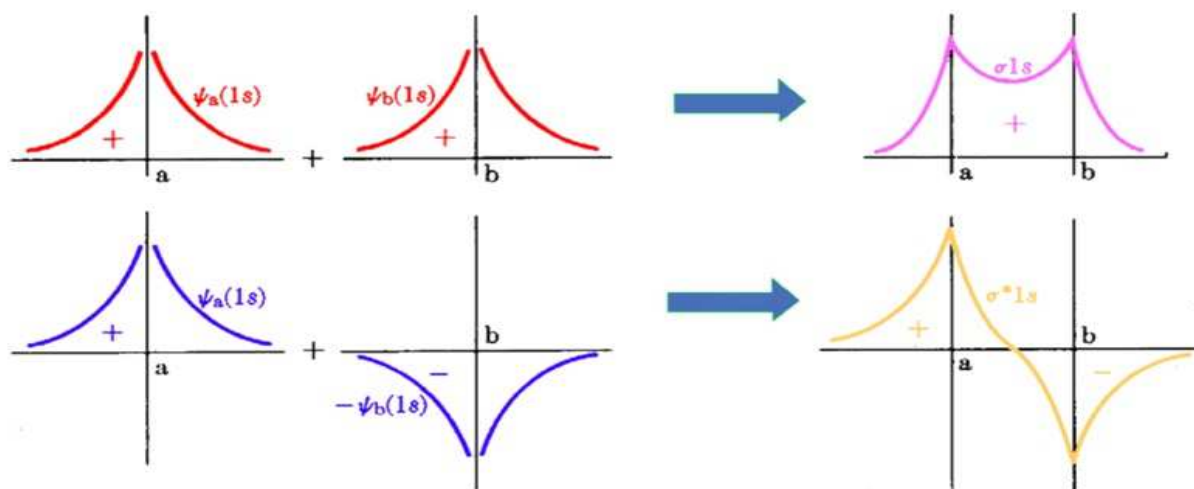
Diferentemente dos modelos de Lewis e da Ligação de Valência, onde os elétrons estão localizados em átomos ou entre pares de átomos, no Modelo do Orbital

Molecular, todos os elétrons de valência estão deslocalizados sobre toda a molécula. Esse modelo descreve os elétrons nas moléculas, utilizando funções de onda chamadas Orbitais Moleculares. A ligação covalente é agora descrita em termos de orbitais moleculares distribuídos por toda a molécula. Um orbital molecular Ψ é explicado em termos de uma Combinação Linear de Orbitais Atômicos (LCAO), sendo que essa combinação entre dois orbitais atômicos pode ocorrer de duas formas. Nesse sentido, quando os átomos se aproximam e seus orbitais atômicos se superpõem, formam-se orbitais moleculares. Dentro desse contexto, Brady e Humiston (1986, p.176) ressaltam que:

Não se tem uma descrição precisa de quais são as formas destes orbitais moleculares numa molécula ou num íon particular. O que parece ser uma descrição aproximadamente correta é considerá-los uma combinação dos orbitais atômicos que residem nos núcleos que constituem a molécula. Estas combinações são construídas considerando-se as interferências construtivas e destrutivas das ondas eletrônicas dos átomos na molécula.

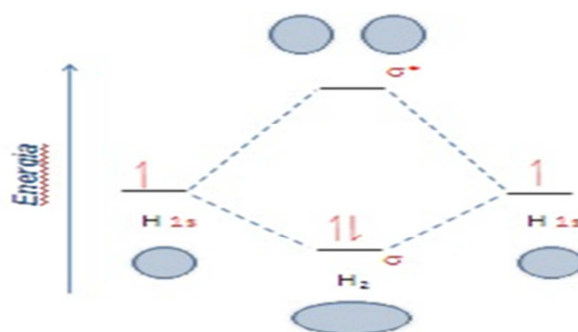
Seguindo-se esta ideia, na combinação aditiva, forma-se um orbital molecular conhecido como σ -orbital ligante (obtido por interferência construtiva), menos energético que os orbitais atômicos e, na subtrativa, forma-se uma orbital molecular mais energético, chamado de σ^* orbital antiligante (obtido por meio da interferência destrutiva; o asterisco significa que ele é antiligante). O primeiro tende a estabilizar a ligação química, enquanto que o último tende a desestabilizá-la. A seguir, as Figuras, 17 e 18 representam, respectivamente, a formação de orbitais moleculares e o diagrama de níveis de energia de orbitais moleculares da molécula de H_2 :

Figura 17 – Formação de orbitais moleculares, ligante e antiligante por meio da adição e subtração de orbitais atômicos.



Fonte: <http://qui.ufmg.br/~ayala/matdidatico/tom.pdf>

Figura 18 – Diagrama de níveis de energia de orbitais moleculares da molécula de H_2 . Observe a ocupação dos orbitais pelos elétrons. Os orbitais de mais baixa energia são ocupados primeiramente desde que o princípio da exclusão de Pauli seja satisfeito.



Fonte: <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/?p=582>.

Os cálculos, para essa situação, podem ser obtidos da Mecânica Quântica, mas, para isso, será necessária a utilização de funções de onda que descrevem elétrons 1 e 2 em torno aos núcleos X e Y, propostos conforme as equações a seguir:

$$\Psi_a = \Psi_{x(1)} \cdot \Psi_{y(2)} + \Psi_{x(2)} \cdot \Psi_{y(1)} \text{ (representa orbital ligante)}$$

$$\Psi_s = \Psi_{x(1)} \cdot \Psi_{y(2)} - \Psi_{x(2)} \cdot \Psi_{y(1)} \text{ (representa orbital antiligante)}$$

Ademais, a estabilidade da molécula de hidrogênio, por exemplo, pode ser explicada de forma que sua energia é menor em relação aos átomos separados. Em geral, para o Modelo do Orbital Molecular: “[...] todos os elétrons de valência têm influência na estabilidade da molécula. (Elétrons das camadas inferiores também podem contribuir para a ligação, mas para muitas moléculas simples o efeito é demasiado pequeno)” (RUSSELL, 1994, p.948).

Outros tipos de orbitais aparecem em uma molécula de H₂O poliatômica. Nessa molécula, quando um orbital está ocupado e não contribui para a ligação (ou orbital antiligante) têm-se orbitais não ligantes. Em alguns casos, esse tipo de orbital é apenas um orbital atômico; em outras, é uma combinação linear de orbitais atômicos de átomos que não são vizinhos e, por conseguinte, uma extensão de sobreposição negligenciável.

Outro conceito que faz parte desse modelo é a Ordem de Ligação (OL), a qual se refere à força de uma ligação química. O valor da ordem de ligação indica o número de ligações feitas entre dois átomos. Quanto maior a ordem de ligação, mais curta e mais forte (mais energética) é a ligação química. Na TOM, a ordem de ligação é definida como:

$$OL = \frac{(\text{n. de elétrons nos OMs ligantes}) - (\text{n. de elétrons nos OMs antiligantes})}{2}$$

Por exemplo, a ordem de ligação na molécula de H₂ é:

$$\text{Ordem de Ligação} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

Portanto, o Modelo do Orbital Molecular surge como uma melhor alternativa para os limites apresentados aos modelos de Lewis, sendo mais facilmente utilizado nos cálculos do que o modelo da Ligação de Valência, conforme apontam Atkins e Jones (2006). Porém, esse modelo, assim como os outros apresentam dificuldades explicativas, tem falhas quando tentar aplicar as ligações no estado sólido.

4.1.4 Síntese da seção

Nesta seção, a partir de aportes históricos e filosóficos, mostram-se os modos como os modelos de Gilbert Newton Lewis, da Ligação de Valência e do Orbital Molecular explicam a natureza da ligação covalente.

Diante do exposto, verifica-se que nenhum dos modelos investigados consegue explicar todos os aspectos da ligação covalente. Apesar dos modelos de Lewis, da LV e do OM apresentarem limitações, cada um deles tem importância histórica. Tais modelos descrevem distintamente as ligações nas moléculas, mas com finalidades diferentes.

Parece mais do que claro que o modelo que se aplica em cada caso particular depende muito do aspecto da ligação covalente que se deseja explicar. Por exemplo, o modelo da Ligação de Valência fornece um retrato mais qualitativo da estrutura molecular e de uma ligação química, ou seja, ela se refere à estabilidade da ligação covalente em termos de sobreposição de orbitais atômicos; enquanto que, ao contrário do modelo de Lewis e da Ligação de Valência, o modelo do Orbital Molecular fornece um retrato mais quantitativo.

As explicações dos modelos têm como foco, superar certas dificuldades explicativas (ou melhor, esclarecer certas propriedades) que outros modelos não explicam. Por exemplo, o modelo do Orbital Molecular pode explicar a existência de compostos deficientes em elétrons, o paramagnetismo da molécula de O_2 , a descrição de moléculas em estados excitados de alta energia, dentre outros. Observa-se, portanto, que os modelos podem ser alargados (ou expandidos) para outros casos.

É preciso considerar ainda que há diferenças ontológicas quando comparamos, por exemplo, LEWIS e OM (LABARCA; LASTIRI, 2010). Quando comparamos o Modelo do Orbital Molecular com o Modelo da Ligação de Valência as diferenças são diluídas, já que a teoria que as norteia é a Mecânica Quântica. Convém destacar que existe incompatibilidade entre as perspectivas teóricas, conforme ocorre na LV e na OM. Nesse sentido, considera-se que os Modelos da Ligação de Valência, bem como do Orbital Molecular, ambos oriundos da teoria quântica da ligação química, constituem métodos aproximados para resolver a equação de Schrodinger para um sistema molecular: são descrições distintas de um sistema molecular dentro do formalismo da Mecânica Quântica, são formas incompatíveis de conceber uma molécula.

5 ABORDAGEM METODOLÓGICA

Esta seção compreende o percurso metodológico para dar cumprimento aos objetivos estabelecidos.

5.1 O DELINEAMENTO METODOLÓGICO

A presente pesquisa foi realizada através do método qualitativo (CRESWELL, 2007), constituindo-se de um estudo exploratório, descritivo, compreensivo, configurando-se como análise de documentos – os livros didáticos. Nesse sentido, Creswell (2007, p.189-90) destaca: “a ideia por trás da pesquisa qualitativa é selecionar propositalmente participantes ou locais (ou documentos ou materiais gráficos) mais indicados para ajudar o pesquisador a entender o problema e a questão de pesquisa.”

O plano de análise é o responsável por organizar, sistematizar e extrair sentido dos dados de textos ou imagens (CRESWELL, 2007). Assim, para análise dos dados foi aplicada a técnica da análise temática (BARDIN, 1977). A extração e análise de documentos ocorreram em três etapas. A primeira etapa, pré-análise, consistiu na organização dos documentos a serem analisados, tendo como ponto de partida os documentos relacionados ao campo estruturante da representação e linguagem (ADÚRIZ-BRAVO, 2001), discutidas no âmbito da Filosofia da Ciência e, especialmente, na Filosofia da Química.

Os livros didáticos de Química foram escolhidos a partir de uma breve consulta aos professores do Instituto de Química, da Universidade Federal da Bahia, que ensinam os conteúdos para os cursos de Química e para vários outros cursos de ciências exatas na Universidade. Os livros por eles indicados foram os escolhidos para este estudo. Assim, dos 11 docentes consultados, 6 indicaram 6 livros, cujos títulos coincidiram; 2 docentes sugeriram os 6 livros já indicados, mais a inclusão de 2 livros e 3 docentes indicaram 3 livros que já haviam sido indicados por outros docentes. Dessa forma, chegou-se ao *corpus* da pesquisa: 8 livros didáticos de Química.

A segunda etapa, a exploração do material, consistiu essencialmente na operação da codificação. Buscou-se realizar recortes dos textos selecionados para

classificar os referidos recortes nas categorias temáticas. Optou-se por definir as categorias de análise com base nos artigos, textos e livros selecionados vinculados diretamente aos modos de explicação Química. Dessa forma, com base nas etapas de pré-análise e de exploração material, foram definidas as seguintes categorias temáticas:

a) Relação modelo/teoria e explicação química (MORGAN; MORRISON, 1999; DEL RE, 2000, 2003; ADÚRIZ-BRAVO, 2001; BROWN, 2003; HARRÉ, 2003; GIERE, 2004; WEISBERG, 2004; WOODY, 2004; RIBEIRO, 2014; SCHUMMER, 2014).

b) O problema da explicação estrutural (WOOLLEY, 1978; 1985; VAN BRAKEL, 1999; DEL RE, 2000; HENDRY, 2004, 2008, 2010; LABARCA; BEJARANO; EICHERL, 2013).

c) O problema do reducionismo (HENDRY, 1999; SCERRI, 2000, 2007; VAN BRAKEL, 2000; WOODY, 2000; LABARCA, 2006; BEJARANO; LABARCA; EICHLER, 2013; ERDURAN; MUGALOGU, 2014).

d) Uso da diagramacidade (SCHUMMER, 1998, 1999, 2003a; WOODY, 2000; GOODWIN, 2008; RIBEIRO, 2014).

Além disso, em cada um dos livros escolhidos selecionaram-se os capítulos sobre ligação covalente e destacaram-se os momentos em que apareceram os modos de explicação química. No entanto, focando a obtenção de dados relevantes para a pesquisa, foram destacados ainda outros trechos, fora dos capítulos dedicados à discussão da ligação química, em que apareceram as perspectivas teóricas.

Por fim, a terceira etapa, refere-se ao tratamento e interpretação dos dados obtidos. Para Bardin (1977, p.101), na análise dos dados, “[...] o analista, tendo à sua disposição resultados significativos e fieis, pode então propor inferências e adiantar interpretações a propósito dos objetivos previstos, ou que digam respeito a outras descobertas inesperadas.”

5.2 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS: COLETA DE DADOS

Adotaram-se, como objeto de coleta de dados, os livros didáticos, exclusivamente do ensino universitário, mais utilizados na graduação em Química,

os quais abordam as perspectivas teóricas investigadas no nível de Química Geral. Nessa perspectiva, foram contatados 11 docentes do Departamento de Química Geral e Inorgânica, da Universidade Federal da Bahia, e solicitados a indicar os livros didáticos que atendessem aos objetivos da pesquisa, de acordo com o Quadro 1, a seguir:

Quadro 1 - Livros didáticos de Química selecionados para a pesquisa.

Ano	Livros Didáticos	Autores (as)	Edição	Nível	Código
2006	Princípios de Química Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente	Atkins, Jones	3 ^a	Superior	LD1
2005	Química, A Ciência Central	Brown, Lemay, Bursten, Burdge	9 ^a	Superior	LD2
2009	Química Geral e Reações Químicas	Kotz, Treichel, Weaver	6 ^a	Superior	LD3
2011	Química	Masterton, Slowinski, Stanitski	6 ^a	Superior	LD4
1994	Química Geral	Chang	5 ^a	Superior	LD5
1994	Química Geral	Russell	2 ^a	Superior	LD6
1986	Química	Brady, Humiston	2 ^a	Superior	LD7
1979	Química	Quagliano, Vallarino	3 ^a	Superior	LD8

Fonte: Elaboração do autor.

6 LIGAÇÃO QUÍMICA NOS LIVROS DIDÁTICOS

Na presente seção, apresenta-se a análise dos livros didáticos de Química à luz das categorias temáticas definidas previamente. Com isso, buscou-se verificar quais temas, vinculados ao campo estruturante da representação e linguagem, defendido por Adúriz-Bravo (2001), os livros didáticos de Química apontam.

6.1 LIVRO DIDÁTICO 1 (LD1)

Atkins e Jones (2006, p.197) iniciam o capítulo 3, intitulado *Forma e Estrutura das Moléculas*, visando a apresentar as perspectivas LV e OM, e consideram: “Os outros dois modelos são mais bem elaborados. Essas teorias descrevem a distribuição dos elétrons e sua participação na determinação da forma da molécula, em termos de descrições simplificadas dos orbitais disponíveis.”

Verifica-se que os autores fazem uso dos termos teorias e modelos de forma indiscriminada, sendo que, no início do texto, apresentam o tratamento das perspectivas LV e OM como modelos e, logo após, apresentam-nas como teorias. Contudo, tais perspectivas são tratadas como modelos/teorias. Vale ressaltar que o uso indiscriminado se faz presente em muitos momentos do livro, porém destacam-se somente alguns deles que buscam sustentar nossa análise.

Ainda, nessa perspectiva, Atkins e Jones, ao tratar da LV, destacam:

A primeira descrição da ligação covalente em termos de orbitais atômicos foi feita por Walter Heitler, Fritz London, John Slater e Linus Pauling, no fim dos anos 20. Ela é chamada de **teoria da ligação de valência** (teoria VB). Esta teoria é um modelo quantomecânico da distribuição dos elétrons pelas ligações que ultrapassa a teoria de Lewis (ATKINS; JONES, 2006, p.208).

Constata-se, também, que os autores incluem na abordagem da LV a perspectiva de Lewis, tratando-a como teoria. Entretanto, mais adiante, tratam como modelo, conforme pode ser observado a seguir: “[...] no modelo de Lewis das ligações químicas, cada par de elétrons ligantes está localizado entre dois átomos ligados, isto é, trata-se de *um modelo com os elétrons localizados*.” Verifica-se, de forma clara, que todas as perspectivas (ou seja, LEWIS, LV e OM), são tratadas como modelos/teorias (ATKINS; JONES, 2006, p.206).

Entendemos que a relação entre modelos/teorias e explicações químicas é apresentada no livro seguindo a norma: se precisamos de explicações químicas, precisamos de modelos/teorias. Nessa perspectiva, a explicação tem como foco superar certas inconsistências ou dificuldades explicativas que o modelo/teoria possui, assim como alegam Atkins e Jones (2006, p.218): “[...] ao contrário da teoria de Lewis, a teoria do orbital molecular pode explicar a existência de compostos deficientes em elétrons e o paramagnetismo do oxigênio.”

Verifica-se que os autores reconhecem a importância da relação da forma e a estrutura das moléculas com as propriedades. Nesse sentido, eles admitem que a forma da molécula “[...] afeta as propriedades dos materiais que nos rodeiam, incluindo seus estados físicos e suas solubilidades” (ATKINS; JONES, 2006, p.197). Para eles, o conceito de estrutura molecular é um tema importante nas explicações químicas e, sobretudo, na identidade das moléculas. Entretanto, o problema da explicação estrutural é apenas mencionado pelos autores, conforme se vê a seguir:

No modelo de Lewis das ligações químicas, cada par de elétrons ligantes está localizado entre dois átomos ligados, isto é, trata-se de um *modelo com elétrons localizados*. Sabemos, no entanto, a partir da dualidade onda-partícula do elétron (Seções 1.3-1.5), que a posição de um elétron em um átomo não pode ser descrita de forma precisa, mas somente em termos de probabilidade de encontrá-lo em algum lugar do espaço definido pelo orbital (ATKINS; JONES, 2006, p.207-08).

Em relação ao reducionismo estrutural, Atkins e Jones (2006, p.217) consideram o modelo OM como o que melhor descreve a ligação covalente: “[...] mostrou ser melhor para descrição da ligação química.”

Em geral, diagramas esquemáticos são usados para representar, visualizar, descrever e fundamentar as explicações das teorias quânticas, por exemplo, “[...] o diagrama esquemático dos orbitais moleculares da molécula HF” (ATKINS; JONES, 2006, p.224). Nesse sentido, os autores alegam que:

Na teoria da ligação de valência, imaginamos que as ligações se formam quando elétrons desemparelhados de orbitais atômicos da camada de valência formam pares. Os orbitais atômicos que eles ocupam se superpõem cabeça-cabeça para formar as ligações σ ou lateralmente para formar ligações π (ATKINS; JONES, 2006, p.210).

Concordando com Woody (2000), tais diagramas fundamentam a explicação química, sendo ferramentas valiosas do raciocínio químico que facilitam o entendimento da ligação química, bem como as energias envolvidas.

6.2 LIVRO DIDÁTICO 2 (LD2)

Em relação à perspectiva de Lewis, Brown, Lemay, Bursten e Burdge (2005, p.303) afirmam: “[...] a teoria de Lewis, a ligação covalente ocorre quando os átomos compartilham elétrons.” Assim, verifica-se que Lewis é tratado como teoria. Já no início do capítulo 9, denominado *Geometria molecular e teorias de ligação*, em “*O que está por vir*”, os autores alegam:

Examinaremos a teoria de ligação de valência, um modelo de ligação molecular que nos ajuda a entender por que as moléculas formam ligações e por que têm as formas espaciais que têm. Finalmente, abordaremos a teoria do orbital molecular, um modelo de ligação química que favorece compreensão mais clara da estrutura eletrônica das moléculas (BROWN et al., 2005, p.289).

Os autores, ao tratarem das perspectivas LV e OM, fazem uso dos termos modelos e teorias de forma indiscriminada; ora as apresentam como teorias, ora como modelos. Assim, verificou-se que Lewis é tratado como teoria. Já as perspectivas LV e OM são tratadas como modelo/teoria.

Ainda vale destacar a posição realista dos autores ao tratarem do Modelo do Orbital Molecular. Nesse sentido, admitem que se pode obter “[...] sua distribuição de densidade eletrônica pelo uso de uma representação de superfície limite, assim como fizemos quando abordamos orbitais atômicos” (BROWN et al., 2005, p.316).

O problema da explicação estrutural é mencionado no livro, apenas quando os autores alegam que “[...] diferentemente dos orbitais atômicos, os OMs estão associados com a molécula como um todo, e não como único átomo” (BROWN et al., 2005, p.316). O livro não aponta para o problema do reducionismo.

Os diagramas são utilizados para promover a visualização, identificação da composição química, estrutura e para sustentar as explicações químicas, conforme a passagem a seguir:

O diagrama mostra cada átomo de oxigênio atinge um octeto de elétrons compartilhando dois pares de elétrons com o carbono. O

carbono, por outro lado, atinge um octeto de elétrons compartilhando dois pares com dois átomos de oxigênio (BROWN; LEMAY; BURSTEN; BURDGE, 2005, p.261).

Figura 19 – Diagrama para a molécula de CO₂.



Fonte: Brown e colaboradores (2005)

6.3 LIVRO DIDÁTICO 3 (LD3)

No LD3, intitulado *Química Geral e Reações Químicas*, os autores ao comentarem sobre as “perspectivas históricas” de Lewis, alegam:

Desenvolvendo os Conceitos de Ligação e Estrutura

Gilbert Newton Lewis (1875 – 1946) introduziu a teoria da ligação química através de pares de elétrons compartilhados em um artigo publicado no *Journal of the American Chemical Society* em 1916. Essa teoria revolucionou a química, e é para homenagear sua contribuição que as estruturas receberam seu nome (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p.362).

Verifica-se que os autores apresentam Lewis como teoria. Porém, quando tratam da LV, apresentam como modelo, conforme se observa a seguir: “[...] colocar os elétrons entre os núcleos também iguala o modelo de Lewis para os elétrons.” (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p.382). Lewis, contudo, é tratado no livro como modelo/teoria.

No capítulo 10, denominado *Ligações e Estrutura Molecular: Hibridização de Orbitais e Orbitais Moleculares*, eles apresentam a LV inicialmente a como teoria dentro do tópico *Orbitais e Teorias de Ligação*, conforme destacado a seguir: “[...] a ideia de que as ligações são formadas pela sobreposição de orbitais atômicos é a base para a teoria da ligação de valência”. Porém, como subtítulo nos apresenta como modelo em *O Modelo de Ligação da Sobreposição de Orbitais*. Dessa forma, a LV é tratada como modelo/teoria (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p. 382).

Os autores, ao discutirem sobre diferenças entre as duas teorias quânticas, apresentam:

Por que duas teorias são usadas? Uma não seria mais correta do que a outra? Na verdade, ambas fornecem boas descrições da ligação nas moléculas e nos íons poliatômicos, mas são usadas para finalidades diferentes. A teoria da ligação de valência é geralmente o método de escolha para fornecer um retrato qualitativo, visual, da estrutura molecular e de uma ligação. Essa teoria é particularmente útil para moléculas compostas de muitos átomos. Em contraste, a teoria do orbital molecular é usada quando é necessário um retrato quantitativo da ligação. Além disso, a teoria da ligação de valência fornece uma boa descrição das ligações em moléculas em seu estado de energia mais baixo, fundamental. Por outro lado, a teoria OM é essencial se quisermos descrever moléculas em estados excitados de energia mais alta. Entre outras coisas, isso é importante para explicar as cores dos compostos (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p.381).

Quanto à apresentação do modelo OM, eles ainda comentam sobre o paramagnetismo da molécula de O_2 , considerando-a como teoria, conforme destacado a seguir:

A abordagem do orbital molecular pode esclarecer essa propriedade, mas a teoria da ligação de valência não pode. Para ver como a teoria do OM pode ser usada para descrever a ligação no O_2 e em outras moléculas diatômicas, descreveremos primeiro os quatro princípios usados para desenvolver a teoria (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p. 398).

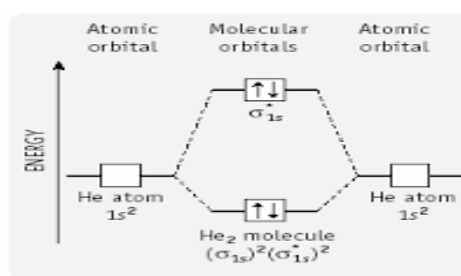
O tratamento em relação a Lewis e LV remete ao LD1 - o uso dos termos modelos e teorias de forma indiscriminada. Verifica-se que os autores apontam para o problema da explicação estrutural, assim como em outros livros, mas não discutem, conforme se evidencia a seguir:

A abordagem da ligação de valência está intimamente relacionada à ideia de Lewis de ligar pares de elétrons entre átomos e pares de elétrons isolados localizados em determinado átomo. Em contraste, a abordagem de Mulliken foi derivar orbitais moleculares que são "espalhados" ou deslocalizados sobre a molécula (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p. 381).

Kotz, Treichel e Weaver (2009, p.381) apresentam uma cota de pensamento em relação ao reducionismo, uma vez que consideram que "[...] o modelo mecânico quântico do átomo, que é a maneira mais bem sucedida de explicar as propriedades dos átomos que os cientistas já criaram, descreve os elétrons como ondas."

Os diagramas são utilizados pelos autores para sustentar as explicações de certos aspectos das teorias da ligação química. Por exemplo, no modelo OM, ao comentarem sobre o diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares para a molécula He_2 , admitem que um “[...] diagrama fornece um argumento para inexistência da molécula. No He_2 , tanto do orbital ligante (σ_{1s}) quanto o orbital antiligante (σ_{1s}^*) seriam completamente preenchidos.” (KOTZ; TREICHEL; WEAVER, 2009, p.399).

Figura 20 – Diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares para molécula He_2 .



Fonte: Kotz, Treichel e Weaver (2009).

6.4 LIVRO DIDÁTICO 4 (LD4)

No LD4, capítulo 9, Masterton, Slowinski e Stanitski (2011, p.192) indicam “[...] como escrever as estruturas de Lewis. Para moléculas muito simples, as estruturas de Lewis podem ser escritas por mera inspeção.” Ainda, os autores alegam:

Segundo este modelo, ambos os átomos de F adquirem a configuração eletrônica $1s^2 2s^2 2p^6$, que é a configuração do gás nobre neônio. Isto de acordo com Lewis, explica por que a molécula F_2 é estável...

As estruturas que acabamos de ver são conhecidas como estruturas de Lewis (MASTERTON; SLOWINSKI; STANITSKI, 2011, p.191).

No capítulo 10, intitulado *Estrutura Molecular*, aparece:

No momento, consideraremos duas teorias distintas: modelo do orbital atômico ou ligação de valência (Seção 10.3). Nesta teoria, os elétrons de valência estão distribuídos entre orbitais que são característicos dos átomos individuais. O modelo da ligação de valência pode ser aplicado às moléculas que “violam” a regra do octeto, bem como àquelas que a “obdecem”; modelo do orbital molecular (Seção 10.5). Neste modelo, os elétrons de valência estão distribuídos entre orbitais que são característicos da molécula como um todo. A teoria do orbital molecular tem sido aplicada, com admirável sucesso, a uma grande variedade de substâncias (MASTERTON; SLOWINSKI; STANITSKI, 2011, p. 206).

Conforme descrito no capítulo 9, verifica-se que os autores ao discutirem sobre a configuração eletrônica do flúor apresentam Lewis como modelo. Com base no texto, as perspectivas da LV e do OM aparecem como duas teorias inicialmente e, logo após, como dois modelos. Assim como ocorreu no LD1, LD2 e LD3, o uso dos termos “modelos” e “teoria” é feito de forma discriminada. Nessa perspectiva, LV e OM são tratadas como modelo/teoria.

Quanto à natureza da explicação química, Masterton, Slowinski e Stanitski (2011, p. 221) alegam que

Usamos a teoria da ligação de valência para explicar a ligação em moléculas. Ela se refere, ao menos qualitativamente, à estabilidade da ligação covalente em termos do entrosamento de orbitais atômicos. Utilizando a hibridização, a teoria de ligação de valência pode lidar com as geometrias moleculares previstas pela repulsão de pares de elétrons.

Entende-se, assim como em outros trechos do livro, que os autores enfatizam dois objetivos primários das teorias da ligação química: previsão e explicação. Um aspecto que chama a atenção diz respeito ao modo pelo qual os autores destacam o papel das teorias quânticas na Química. Para eles, tais teorias não têm como função testar teorias, a intenção é melhorá-las. Para tanto, Masterton, Slowinski e Stanitski (2011, p.214) destacam que “[...] para explicar esta e outras discrepâncias, a teoria simplificada da ligação de valência deve ser modificada. É necessário criar um novo tipo de orbital atômico, denominado orbital híbrido.” Essa posição se aproxima da de Caldin (2002).

Outras características, tais como o problema da explicação estrutural e reducionismo, não aparecem no livro. Em relação à diagramacidade, os autores fazem o uso de diagramas para representar certos aspectos da ligação química (por exemplo, a geometria das moléculas) e para fundamentar suas explicações.

6.5 LIVRO DIDÁTICO 5 (LD5)

No LD5, Chang (1994, p. 374) comenta sobre LEWIS no capítulo 9, intitulado *Ligação Química I: Conceitos Básicos*, que:

Uma **estrutura de Lewis** é uma representação das ligações covalentes utilizando a notação de Lewis na qual os pares de electrões partilhados mostram quer como pares de pontos entre dois átomos e os pares isolados se mostram como pares de pontos em átomos individuais. Nas estruturas de Lewis apenas se representam os electrões de valência.

Ainda, no início do capítulo 10, denominado *Ligação Química II: Orbitais Moleculares e Geometria Molecular*, o autor destaca que

A teoria de Lewis, da ligação química, embora seja útil e simples de aplicar, não nos diz como e porque se formam as ligações químicas. Só a Mecânica Quântica pode fornecer respostas adequadas a estas perguntas. Assim, sendo, na segunda parte deste capítulo, aplicaremos a Mecânica Quântica ao estudo da geometria e estabilidade moleculares (CHANG, 1994, p.410).

Em um texto intitulado *Modelos Moleculares*, Chang (1994, p.422) comenta:

Não podemos observar diretamente as moléculas por causa do seu tamanho extremamente pequeno. Uma maneira eficiente de visualizar a estrutura tridimensional das moléculas, muitas vezes difícil de descrever por palavras ou diagramas, é através de modelos moleculares. Os modelos moleculares de uso corrente pertencem a dois tipos principais: modelos de vareta-e-bola e modelos espaciais (ou de representação de volume). Nos modelos de vareta-e-bola, os átomos são representados por esferas de madeira ou plástico, em que se escavam orifícios. Estes orifícios são utilizados para segurar as varetas (ou molas, caso em que também se chamam mola-e-bola) que representam as ligações químicas e que se colocam no modelo de modo a formarem ângulos semelhantes aos ângulos reais nas moléculas. Cada tipo de átomo é representado por uma esfera de cor diferente, esferas essas que têm todas o mesmo tamanho. Nos modelos espaciais, os átomos são representados por

esferas truncadas que se ligam através de encaixes, não deixando visíveis as ligações químicas. Nestes modelos, os raios das esferas estão à escala em relação aos raios atômicos.

Em relação às perspectivas LV e OM, ainda alega:

Utilizam-se actualmente duas teorias aproximadas da Mecânica Quântica para descrever a formação de ligações covalente e a estrutura electrónica das moléculas. A Teoria do Enlace de Valência (TEV) postula que os electrões numa molécula ocupam orbitais atômicas dos átomos individuais. Permite-nos reter uma imagem individual dos átomos que participaram na formação das ligações. A segunda Teoria chama-se Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM) e pressupõe a formação dos orbitais moleculares a partir dos orbitais atômicas. Embora nenhuma destas teorias permita explicar completamente todos os aspectos da ligação química, cada uma delas deu o seu contributo para a nossa compreensão de muitas propriedades das moléculas que conhecemos (CHANG, 1994, p. 427).

De acordo com os textos, Chang apresenta Lewis como teoria e LV e OM como teorias aproximadas. Ademais, a ênfase acerca da explicação química pelas teorias é alegada por Chang (1994, p.427), ao considerar que “[...] embora nenhuma destas teorias permita explicar completamente todos os aspectos da ligação química, cada uma delas deu seu contributo.” Parece mais do que claro que as perspectivas teóricas tratadas nesse livro ressaltam os objetivos de uma teoria: descrição e explicação.

Observa-se que o autor ao comentar sobre as limitações de Lewis, apresenta uma cota de pensamento em direção à questão do reducionismo estrutural, ao afirmar que “[...] só a Mecânica Quântica pode fornecer respostas adequadas.” No que diz ao problema da explicação estrutural, Chang (1994, p.454) apenas destaca em *Orbitais Moleculares Deslocalizados*:

Até agora apenas discutimos a ligação química em termos de pares de electrões. Contudo, é frequentemente existirem casos em que as propriedades de uma molécula não podem explicadas com exactidão por uma única estrutura. Um exemplo é o da molécula de O_3 .

Quanto ao uso de diagramas, os autores acreditam que modelos moleculares ajudam a visualizar o arranjo tridimensional dos átomos de uma molécula.

6.6 LIVRO DIDÁTICO 6 (LD6)

O livro do Russell se diferencia dos livros anteriores, por apresentar a perspectiva de Lewis exclusivamente como “estruturas”, conforme destacado a seguir:

Em 1916, o químico norte-americano G. N. Lewis, desenvolveu um método de colocar os elétrons em átomos, íons e moléculas. Este método faz uso de diagramas, agora chamados de estruturas de Lewis. A estrutura de Lewis para um átomo consiste no seu símbolo químico, rodeado por um número de pontos (ou algumas vezes de • ou x; ver Seção 8.2) correspondentes ao número de elétrons da camada de valência do átomo (RUSSELL, 1994, p.343).

Em outro momento, ao comentar sobre LV e OM no capítulo 19 intitulado *Ligações Covalentes*, Russell (1994, p.927) aponta:

Duas abordagens teóricas são úteis para descrever a ligação covalente e a estrutura eletrônica das moléculas. A primeira delas, chamada *teoria de ligação de valência* (VB)¹, é baseada na suposição de que (1) os níveis eletrônicos de energia em um átomo (orbitais atômicos; AOs) são usados quando o átomo forma uma ligação com um ou mais outros átomos, e que (2) um par de elétrons ligados ocupa um orbital em cada um dos átomos simultaneamente. O segundo método, a *teoria dos orbitais moleculares* (MO) assume que os orbitais atômicos originalmente ligados são substituídos por um novo conjunto de níveis energéticos na molécula, chamados *orbitais moleculares* (MOs). Embora os dois métodos pareçam bem diferentes, sabe-se que cálculos rigorosos usando esses métodos fornecem resultados semelhantes; ambos são úteis na revelação da natureza da ligação covalente.

Verifica-se que Russell faz uso dos termos modelos e teorias de maneira indiscriminada. Nesse sentido, apresenta LV e OM, no início como teorias, porém, mais adiante, ao abordar sobre OM, apresenta como modelos, conforme o contexto a seguir:

N₂, é, sem dúvida, muito estável e comum, e nós inalamos toda vez que respiramos. As medidas magnéticas indicam que todos os elétrons estão emparelhados no N₂. (Não é paramagnético). O modelo do MO da molécula N₂ está muito bem correlacionado com aquele apresentado pela VB (RUSSELL, 1994, p.959).

Em relação à explicação da molécula de N_2 , infere-se que Russell, ao comentar sobre esta molécula, faz uma correlação entre dois modelos, ou seja, o “modelo do MO” (do inglês, significa *molecular orbital*), com modelo LV (cuja sigla VB, do inglês, significa *valence-bond*). O uso indiscriminado é ainda mais enfático, conforme destacado a seguir: “Um dos triunfos da teoria MO, foi a sua capacidade de mostrar que a molécula de O_2 é paramagnética.” Porém, mais adiante o autor considera que “[...] o modelo MO está de acordo com as características magnéticas e de ligação observadas.” As perspectivas teóricas são tratadas no livro, ora como estrutura (em Lewis) e ora como modelo/teoria (em LV e OM) (RUSSELL, 1994, p. 961).

Em relação à explicação estrutural, Russell (1994, p.927) apenas levanta questões acerca do problema, porém não discute, conforme o trecho a seguir:

Como podemos relacionar o simples conceito de par de compartilhado com o modelo da mecânica quântica de um átomo, descrito no capítulo 6? Por exemplo, o que é distribuição natural da densidade de probabilidade para um elétron em uma molécula?

Não se observou o problema do reducionismo estrutural. Ademais, segundo o mesmo autor, diagramas permitem fazer inferências acerca da estabilidade da ligação, geometria molecular, caminhos e reações, por exemplo. A ideia que o autor passa é que o uso de diagramas sugere uma função comunicativa, assim como alega Woody (2000). Nessa perspectiva, Russell (1994, p.357) os utiliza para visualizar e expressar suas metas de investigação, conforme o trecho a seguir:

Imagine que você está segurando um átomo de hidrogênio (núcleo mais um elétron) em cada uma de suas mãos e vagarosamente os aproxima. À medida que isto ocorre, você sentirá uma força atrativa que cresce e tende a fazê-los ficar ainda mais próximos. Se você permite uma aproximação maior ainda, as forças atrativas atingem um valor máximo e em seguida começam a enfraquecer, decrescendo até por completo. Deste momento em diante você terá de puxar os átomos para mantê-los próximos, uma vez que forças atrativas foram substituídas por forças repulsivas que crescem bruscamente com o decréscimo da distância interatômica. Com um par de átomos reais de hidrogênio, esta troca de forças ocorre a uma distância internuclear de 0,0074nm. Dois átomos de hidrogênio permanecem nesta distância de equilíbrio por que em distâncias maiores são atraídos e em distâncias menores são repelidos.

Há, nessa passagem, a descrição feita por Russell de cunho concreto, ainda que hipotético, pois sugere ao estudante que imagine a possibilidade de “segurar um átomo”, ou seja, descreve uma experiência de pensamento, que pouco se encontra presente nos livros didáticos.

6.7 LIVRO DIDÁTICO 7 (LD7)

Da mesma maneira como ocorreu no livro anterior, Brady e Humiston, apresentam a perspectiva de Lewis no capítulo 4 como “estruturas”. A seguir, destacamos um trecho que reflete essa postura:

Representação das Estruturas de Lewis

As estruturas de Lewis para as moléculas ligadas covalentemente e para os íons poliatômicos são muito úteis. Uma razão, como veremos no próximo capítulo, é a de nos permitir predizer as formas das moléculas ou íons. Portanto, você precisa saber como representá-las (BRADY; HUMISTON, 1986, p.129).

Em outro momento, no capítulo 5, intitulado *Ligação Covalente e Estrutura Molecular*, Brady e Humiston (1986, p.163), ao comentarem sobre a perspectiva LV e OM, sinalizam:

Há duas abordagens importantes da ligação química baseadas nos resultados da mecânica quântica. Uma destas, chamada **teoria da ligação de valência**, nos permite reter uma visão de átomos individuais aproximando-se para formarem uma ligação covalente. A outra, chamada **teoria dos orbitais moleculares**, vê uma molécula como um conjunto de núcleos positivos com orbitais que se estendem pela molécula inteira. Os elétrons que povoam estes orbitais moleculares não pertencem a nenhum átomo, mas, em vez disso, à molécula como um todo.

De acordo com o texto, os autores apresentam LV e OM como teorias. Contudo, na análise que ora se procedeu, tanto Russell (LD6) como Brady e Humiston (LD7), tratam Lewis apenas como “estruturas”. Para os autores, cada teoria representa uma tentativa de descrever o mesmo fenômeno. Assim, consideram que:

Nenhuma das teorias é perfeita – senão, bastaria levarmos em consideração apenas uma delas. Cada teoria tem seu ponto forte e

seu ponto fraco. A teoria que se aplica em uma circunstância particular depende muito do aspecto da ligação covalente que se está tentando explicar e, de certo modo, do nosso próprio sentimento sobre a validade das diversas teorias (BRADY; HUMISTON, 1986, p.152).

Para os autores, as teorias da ligação química buscam explicar e prever a estrutura molecular. Cabe destacar o caráter aproximado das teorias, assim como asseveram quanto a OM:

Não se tem uma descrição precisa de quais são as formas destes orbitais moleculares numa molécula ou íon particular. O que parece ser uma descrição aproximadamente correta é considera-los uma combinação de orbitais que residem nos núcleos que constituem a molécula. Estas combinações são construídas considerando-se as interferências construtivas e destrutivas das ondas eletrônicas dos átomos na molécula (BRADY; HUMISTON, 1986, p.176).

O livro aponta para o problema da explicação estrutural, mas não discute esse problema. Conforme se observa a seguir: “[...] quando a teoria de valência foi desenvolvida, reconheceu-se que havia numerosos casos em que uma única estrutura de ligação de valência era inadequada para justificar a estrutura molecular” (BRADY; HUMISTON, 1986, p.176). O problema do reducionismo estrutural não é abordado no livro.

Quanto ao caráter diagramático, diagramas fundamentam as explicações químicas, conforme o trecho a seguir: “[...] o diagrama orbital mostra como o nitrogênio completa a sua camada de valência nesse processo” (BRADY; HUMISTON, 1986, p.165). Os diagramas ilustram aproximadamente “[...] as representações das probabilidades de distribuição, previstas pelas funções de onda para os orbitais s e p” (BRADY; HUMISTON, 1986, p.166).

Como se pode observar, diagramas são usados pelos autores para representações esquemáticas das funções de onda dos orbitais. Dentro desse contexto, Brady e Humiston (1986, p.166) alegam que “[...] embora de difícil visualização, a amplitude da onda eletrônica em certos orbitais pode ser positiva em algumas regiões e negativa em outras.” Isto sugere que os autores utilizam diagramas para representações visuais incorporadas por diagramas orbitais, trazendo à tona determinados aspectos da estrutura matemática da teoria quântica, assim como aponta Woody (2000).

6.8 LIVRO DIDÁTICO 8 (LD8)

O livro do Quagliano e Vallarino (1979), ao tratar das perspectivas teóricas investigadas, faz uma mistura daquilo que é apresentada nos demais livros analisados. Nesse sentido, os autores discutem sobre a natureza da ligação covalente: o compartilhamento do par de elétrons, as fórmulas de representação, a geometria associada à estereoquímica de moléculas ou íons poliatômicos e a sobreposição de orbitais atômicos na LV. Por exemplo, quando da representação dos átomos de sódio como Na. e Cl com sete elétrons, no capítulo 13 intitulado *Teoria Eletrônica da Ligação Química*, Quagliano e Vallarino (1979, p. 255) admitem que essas notações são:

Chamadas de fórmulas de Lewis de elétrons puntuais, o símbolo representa o cerne do átomo – o núcleo e mais todos elétrons exceto os que estão na camada mais externa. As fórmulas incluindo os elétrons representados por pontos são úteis especialmente na representação simples da união química de vários átomos.

No capítulo 14, ao tratar especificamente do tema “ligações covalentes em moléculas e íons poliatômicos”, os autores iniciam a discussão da ligação covalente abordando a molécula de hidrogênio, assim como os livros anteriores, porém consideram que:

Os átomos podem ser representados pela fórmula que apresenta elétrons por pontos, H., ou por uma modificação dessa fórmula como $H\uparrow$, em que o elétron está representado por uma seta para a indicação do seu spin. Quando dois átomos de hidrogênio se unem para formar a molécula de H_2 , cada átomo contribui com o seu elétron para formar um par de elétrons com spins opostos. Em geral, a molécula H_2 pode ser representada por uma fórmula com elétrons mostrados por pontos, H:H, ou por esta fórmula modificada como $H\uparrow\downarrow H$. O par de elétrons com spins opostos (: ou $\uparrow\downarrow$) que é compartilhado pelo núcleo dos átomos de hidrogênio ligados na molécula H_2 , constitui o par de elétrons covalente – geralmente chamado par ligante – que une os átomos juntamente (QUAGLIANO; VALLARINO, 1979, p. 279).

Ainda, dentro desse capítulo, Quagliano e Vallarino (1979, p.280) discutem que, na formação da molécula de hidrogênio, “[...] o par ligante ocupa um orbital formado simplesmente pela superposição de orbitais atômicos dos átomos isolados.”

No capítulo 15, assim como ocorreu no capítulo anterior, os autores dão enfoque à “teoria da ligação de valência” associado à estereoquímica. Nesse momento, alegam:

Consideraremos como a estereoquímica de uma molécula ou íon poliatômico pode ser relacionada com os orbitais atômicos envolvidos na formação das ligações covalentes. Este enfoque do estudo das moléculas e íons poliatômicos é chamado método da ligação de valência; ele é muito útil para correlacionar a estereoquímica com a configuração eletrônica. O enfoque da ligação de valência é mais adequado às moléculas e íons poliatômicos cujo o átomo central tenha um cerne simétrico, mas também se aplica bem às moléculas cujo o átomo central tenha um cerne assimétrico – isto é, uma camada eletrônica interna parcialmente preenchida (QUAGLIANO; VALLARINO, 1979, p. 301).

Os autores não apontam os problemas da explicação estrutural e do reducionismo. Quanto ao uso diagramático, eles se referem apenas ao diagrama de orbitais, não tendo sido encontrados diagramas de níveis de energia, assim como ocorreu nos outros livros investigados. Para Quagliano e Vallarino (1979, p.310), os diagramas reforçam as explicações acerca da ligação química, conforme admitem: “[...] os diagramas mostram que nessas duas ligações C-O a densidade eletrônica do par ligante está concentrada entre os dois átomos ligados.” Contudo, os livros analisados em geral deixam de forma bastante clara os limites de cada perspectiva teórica, ou seja, os limites de LEWIS, LV e OM.

6.9 CONSTRUINDO INFERÊNCIAS

Esta seção trata dos livros selecionados e suas implicações no Ensino de Química.

6.9.1 Sobre os livros em geral

Diante dos resultados obtidos, foram construídos quadros comparativos onde está representado o que foi constatado nos livros didáticos de Química selecionados para a pesquisa.

Quadro 2 - Comparativo quanto ao aspecto de considerar teorias ou modelos às perspectivas teóricas de Lewis, LV e OM investigadas nos livros didáticos em geral.

LIVROS	LEWIS	LV	OM
LD1	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD2	Teoria	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD3	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD4	Modelo	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD5	Teoria	Teoria	Teoria
LD6	Estrutura	Modelo/Teoria	Modelo/Teoria
LD7	Estrutura	Teoria	Teoria
LD8	Teoria	Teoria	-

Fonte: Elaboração própria.

Legenda: (-) O LD8, não apresenta a OM.

Quadro 3 - Comparativo quanto da abordagem ou não dos problemas da explicação estrutural e do reducionismo nos livros didáticos em geral.

LIVROS	Abordagem		Não abordagem	
	Explicação	Reduccionismo	Explicação	Reduccionismo
LD1	X	X		
LD2	X			X
LD3	X	X		
LD4			X	X
LD5	X	X		
LD6	X			X
LD7	X			X
LD8			X	X

Fonte: Elaboração própria.

De acordo com os dados obtidos no Quadro 2, verificou-se que há graves problemas nos livros selecionados. Assim, iniciou-se a análise, tendo como ponto de partida duas questões que chamaram bastante a atenção: a primeira revela que dos

8 livros didáticos de Química escolhidos para integrar a pesquisa, 5 (ou seja, LD1/LD2/LD3/LD4/LD6) tratam LV e OM ora como modelos, ora como teorias, ou seja, tais perspectivas são tratadas nos livros como modelo/teoria. Enquanto isso, apenas em LD5, LD7 e LD8, LV e OM aparecem como teorias. Outra questão importante refere-se aos dados obtidos em relação ao LD1 e LD3. Nesse caso, todas as perspectivas teóricas (ou seja, LEWIS, LV e OM) são tratadas nos diferentes livros como modelo/teoria.

Sobre as perspectivas teóricas de LEWIS, pode-se constatar que tais perspectivas são tratadas de maneiras distintas. Logo, Lewis é tratado ora como teoria (conforme ocorreu em LD2/LD5), ora como modelo (em LD4), ora como modelo/teoria (LD1/LD3) e ainda como estrutura (LD6/LD7), ou seja, Lewis é tratado de quatro diferentes formas nos diferentes livros didáticos de Química. Em geral, o tratamento dos livros não é uniforme, uma vez que, as perspectivas teóricas de LEWIS, LV e OM, ora são tratadas como teoria, ora como modelo e ora como modelo/teoria.

Em relação ao Quadro 3, verificou-se que quase todos os livros apontam o problema da explicação estrutural, exceto os livros LD4 e LD8. Porém, o que se observa é apenas uma introdução não problematizadora acerca da explicação. O problema da explicação estrutural (quando aparece nos livros) está fortemente vinculado ao que Woolley (1978) apontou em seu artigo: a contraposição da noção de estrutura com base na teoria quântica em relação à noção clássica. O mesmo ocorre quando da abordagem do reducionismo: dos 8 livros investigados, 5 deles não abordam o problema (conforme constatado em LD2, LD4, LD6, LD7 e LD8). Em contrapartida, apenas 3 apontam para o problema (ou seja, LD1, LD3, LD5). Contudo, os livros de Química Geral, na perspectiva deste estudo, deixam a desejar quanto ao aprofundamento dessas características tão relevantes para a compreensão da natureza da ligação química. Os temas (quando aparecem nos livros) são pobremente apresentados.

Verificou-se que os objetivos primários das teorias da ligação química - previsão e explicação - são constatados nos livros didáticos em geral, assim como sugere Weiberg (2004). Entende-se, assim como Weisberg (2004), que as explicações das perspectivas teóricas pelos livros correspondem ao fato de que: se precisamos de explicações químicas, precisamos construir modelos qualitativos.

Considerando que a Química lida com problemas de muitos corpos, os modelos químicos são essencialmente qualitativos (RIBEIRO et al., 2015).

Os diagramas são amplamente usados pelos livros didáticos com diferentes finalidades: os diagramas de orbitais (se referem a orbitais em caixas ou traços horizontais, contendo ou não setas, acompanhados por letras s, p, d, f e números inteiros) são usados para determinar a configuração eletrônica completa de átomos e íons; e os diagramas de energia são utilizados para representar as diferenças entre os níveis de energia entre os orbitais.

Os livros didáticos recorrem ao uso de diagramas de energia em que orbitais são propostos verticalmente com base no aumento de energia. Vale destacar que os diagramas de energia foram observados em quase todos os livros investigados, exceto no livro do Quagliano e Vallarino (1979). De modo geral, o uso de diagramas confere com que Woody (2000), Goodwin (2008) e Ribeiro (2014) sugerem: o intuito de comunicar, representar, visualizar, descrever e fundamentar as explicações químicas.

Ainda no que diz respeito à natureza das explicações químicas presentes nos referidos livros, verificou-se que tais explicações cumprem o papel pragmático, ao invés do caráter epistemológico, conforme se destacou no trecho a seguir: “[...] a teoria que se aplica em uma circunstância particular depende muito do aspecto da ligação covalente que se está tentando explicar” (BRADY; HUMISTON, 1986, p.152).

6.9.2 Implicações para o Ensino de Química

Em síntese, as análises dos livros didáticos de Química permitiram caracterizar, em relação ao tema modelo/teoria, o tratamento indiscriminado das perspectivas teóricas ora denominando-as como modelo, ora como teoria e ora como modelo/teoria. Frente a essa situação, isso nos leva a discutir algumas implicações para o Ensino de Química.

Verificou-se que o cerne do entrave reside no uso do termo “modelo” e “teoria” no âmbito educativo, como se fossem “sinônimos”. Então, admitindo-se que os livros são bons indicativos do que ocorre na sala de aula, é oportuno ponderar que esse tratamento indiscriminado traz duas implicações. A primeira tem natureza

filosófica. Na realidade, toda investigação científica envolve conceitos de natureza filosófica (LABARCA; BEJARANO; EICHLER, 2013). Amparado nesses autores, entende-se que em toda investigação subjazem determinados postulados filosóficos como os de cognoscibilidade (ou seja, daquilo que podemos conhecer) de verdade e de sua relação com a realidade (ainda que seja, parcial, aproximada ou não, conforme discutido no debate entre realistas e antirrealistas). Além disso, a falta de clareza epistemológica dos termos “modelos” e “teorias” na Ciência se reflete também nos livros didáticos.

Acredita-se que a falta de reflexão filosófica sobre a natureza epistemológica dos dois termos por parte dos autores dos livros analisados deve ter sido o motivo que os levou a tratar de modelos e teorias erroneamente, como se fossem sinônimos. Para Bensaude-Vincent (2008, 2009), a distinção entre esses termos não é um problema genuíno para os químicos, não significa muito em termos operacionais, em termos de realismo operativo, porém, na Ciência em geral, fazer essa distinção torna-se importante tanto do ponto de vista epistemológico, quanto do ponto de vista educacional. Compreender o que são modelos e teorias em aspectos epistemológicos remete ao entendimento da natureza do conhecimento científico, assim como suas condições de validade. É preciso entender, no Ensino de Química, o que é que a Ciência faz e como faz. Tal perspectiva está vinculada à seguinte reflexão: o que se aprende em Química, quando admitimos que ela é uma Ciência baseada em modelos? No ensino, cabe discutir a relação que modelos e teorias têm com o mundo, assim como são produzidos. No que diz respeito à relação entre Ciência e realidade, essa questão remete ao papel central dos modelos e das teorias na construção do conhecimento que ela nos proporciona sobre o mundo. Uma segunda implicação contempla o Ensino de Química. A falta de clareza epistemológica sobre os termos modelos e teorias veiculadas pelos livros quanto ao uso indiscriminado das perspectivas teóricas pode levar professores e estudantes a acreditar que, na Ciência, esses conceitos sejam idênticos, o que é um equívoco, pois um modelo é parte constitutiva de uma teoria, circunscrita em uma teoria, conforme apontam Morgan e Morrison (1999).

Admitiu-se, para efeito deste trabalho, que o Ensino de Química necessita de reflexões filosóficas para ser possível uma aceitação clara em relação à aprendizagem conceitual. Para Adúriz-Bravo (2011), a reflexão acerca da Ciência é incompleta se não levarmos em conta o componente epistemológico. Conforme

salienta esse autor, o caráter instrumental da epistemologia contribui para a melhoria de diversos aspectos do complexo processo de ensino-aprendizagem das ciências e, especialmente, da Química.

Nesse sentido, Ribeiro (2014, p.35) considera que “[...] o debate da filosofia da química constitui um campo disciplinar com elementos intrínsecos em relação aos quais o currículo de química, e principalmente de formação de professores em química, deve tomar partido.” Esse autor problematiza o campo disciplinar da Filosofia da Química, defendendo a constituição do pluralismo da práxis Química como um fundamento da educação química, a partir de uma aproximação entre Currículo, Filosofia e Química. Adúriz-Bravo (2012) defende a superação da concepção sintática de ciência e uma aproximação da versão de ciência embasada em modelos. Para Lombardi e Labarca (2007), temas como explicação, reducionismo e realismo químico devem fazer parte do currículo de Química.

Concordamos com Ribeiro (2014), a partir da análise temática da produção bibliográfica da Filosofia da Química, sobretudo aquela oferecida pelas revistas *HYLE (International Journal for Philosophy of Chemistry)* e *Foundations of Chemistry*. Tais periódicos podem indicar um campo de problemas que pode orientar a didática da Química, bem como o currículo, apesar de atualmente termos poucas aproximações entre Filosofia e currículo (ERDURAN, 2001; ERDURAN; SCERRI, 2002). Acredita-se, com base em Adúriz-Bravo (2001), Erduran (2001), Lombardi e Labarca (2007) e Ribeiro (2014) que a Filosofia da Química pode lançar luzes na Educação Química, sobretudo no que diz respeito aos níveis linguístico e epistemológico.

Laszlo (2012) em *Towards a teacher chemistry as language* caracteriza o Ensino de Química como linguagem, com base em uma linguagem icônica e uma arte combinatória. Labarca (2006), por sua vez, considera importante a inserção da Filosofia da Química no ensino, uma vez que possibilita uma melhor compreensão da natureza da Química, de modo que identificar o seu lugar dentro das Ciências Naturais, sobretudo, em relação à Física. Scerri (2003) reforça tal perspectiva e recomenda o uso de filósofos em questões educacionais, sugerindo aos educadores um conhecimento maior da posição filosófica que assumem. Amparando-se nesses autores, acredita-se que a aproximação entre a Filosofia da Química e o Ensino de Química pode (e deve) lançar luzes na prática docente. Nesse sentido, permite, por exemplo, que os educadores químicos possam discutir os significados dos termos

leis químicas (SCERRI, 2000b), modelos/teorias (MORGAN; MORRISON, 1999; SCERRI, 2000b; ADÚRIZ-BRAVO, 2001; LABARCA, 2006; RIBEIRO, 2014).

Assim, destaca Labarca (2006, p.63): “[...] a construção de modelos é uma atividade central na prática científica da química.” Para Scerri (2000b), diversas questões podem surgir acerca do uso de modelos científicos, pois, como ele próprio indica, algumas vezes os educadores observam frustrações ‘por parte dos estudantes quando da abordagem de distintas explicações químicas para um mesmo fenômeno, caracterizando a crença entre eles de que existe uma explicação. Para Laszlo (2012), os professores devem ajudar os alunos a compreender a exuberância de pluralidade de pontos de vistas das explicações químicas, não como confusão, mas para ajudá-los a penetrar na complexidade do contexto químico. Dessa forma, muitas heurísticas coexistem, não sendo nenhuma privilegiada em função de outra. Para esse autor, elas constituem as muitas formas de ajudá-los ao longo do curso.

A aproximação entre a Filosofia da Química e Ensino de Química pode contribuir para a compreensão de que pode haver diferentes modelos químicos para um mesmo fenômeno (LABARCA, 2006; OH; OH, 2011; ADÚRIZ-BRAVO; LABARCA; LOMBARDI, 2014; SCHUMMER, 2014). Labarca (2006, p.62) ainda esclarece que “[...] não podemos considerar que um modelo seja melhor do que outro em sentido absoluto, mas apenas em relação à perspectiva da investigação.”

Quando da apresentação ou não dos problemas da explicação estrutural e do reducionismo nos livros didáticos de Química, reitera-se implicações relevantes para o Ensino de Química. Concordamos com Lombardi e Labarca (2007, p.387) sobre o problema do reducionismo e, por consequência, da autonomia da Química, quando evidencia “[...] a necessidade de introduzir argumentos filosóficos como um novo recurso pedagógico no Ensino de Química” de maneira que possibilite aos educadores químicos se posicionar diante do problema, a levantar questões e debater em sala de aula com os estudantes, expondo argumentos distintos. A discussão de diferentes perspectivas acerca do tema pode levar os estudantes a compreender a natureza da Química, assim como da sua relação com outras ciências.

Para Scerri (2000b), os princípios da Física, sobretudo, os da Mecânica Quântica, têm sido bastante utilizados para explicar conteúdos da Química, como exemplo, estrutura atômica, tabela periódica e ligação química. Segundo esse autor,

essa perspectiva tem negligenciado, em parte, os aspectos qualitativos e a diversidade de fenômenos observados. Para Scerri (2000b, p.522), os educadores químicos devem “[...] manter um equilíbrio entre princípios unificadores e os aspectos aparentemente mais descritivos e qualitativos”, de maneira que tal posicionamento deve acontecer não somente na prática docente, mas, sobretudo, nos livros didáticos de Química.

Schummer (1998) considera que falar de Química como um campo unificado obscurece a pluralidade de métodos e tradições históricas e objetivos científicos do campo da Química. Lazslo (2012) acrescenta que o problema da redução expõe a pedagogia química a um paradoxo iminente de ser uma ciência indutiva e abdutiva, podendo ser pensada e fundada em explicações de natureza fisicalistas de caráter dedutivo. Isso implica o negligenciamento do caráter pluralista, aproximado e diagramático da Química – seu caráter criativo - tornando o ensino conservador e mecânico.

A despeito dessa temática, poder-se-ia fazer diferentes perguntas frente ao problema do reducionismo, por exemplo: A Química, reduzida ou não reduzida? Contudo, cremos que o caráter redutivo compromete a autonomia da Química, uma vez que a coloca numa posição subordinada à Física. Compreende-se, assim como Kaya e Erduran (2011), que o reducionismo no Ensino de Química exclui possibilidades, fator que pode dificultar o ensino-aprendizagem sobre a natureza do conhecimento químico. Nossa posição se aproxima da concepção de Labarca e Lombardi (2005), os quais defendem a autonomia da Química quanto aos aspectos epistemológicos e ontológicos.

Ressalta-se que as imagens expressas, observadas nos livros didáticos de Química, são representações parciais limitadas, assim como concebem Morgan e Morrison (1999). Entretanto, elas demandam a mobilização da linguagem simbólica química, diagramática, icônica e estilos de pensamento, para além das explicações e representações dos livros didáticos. Os diagramas, como os que acompanham as explicações do tema ligação química, devem exigir do professor compreensões e discussões que remetem ao nível teórico-conceitual, bem como à especificidade da linguagem química.

Entende-se, assim como apontam os trabalhos de Adúriz-Bravo (2001), Justi (2006) e Ribeiro (2014), que o uso acrítico de modelos no ensino pode levar estudantes a entender modelos como brinquedos (por exemplo, bolas que

substituem átomos ou palitos que substituem ligações químicas), cópias da realidade e cópias reais das moléculas. Tal substituição de signos icônicos e simbólicos por signos pictóricos podem gerar outros problemas, tais como a “[...] separação da informação conceitual da representação física apropriada; foco nos modelos químicos como modelos físicos, subestimando-se a complexidade e diversidade dos modelos químicos” (RIBEIRO, 2014, p.253).

A diagramacidade do pensamento químico pode ser entendida como um estilo do pensamento químico (RIBEIRO, 2014). Desenvolvendo o entendimento do pensamento diagramático na práxis Química, outros autores, como Goodwin (2008) e Woody (2000), apontam que um diagrama tem como característica: ser expressivo, representativo, operativo, explicativo, descritivo e heurístico. Contudo, concordamos com Schummer (1999, 2003a) e Goodwin (2008) que a diagramaticidade é uma característica importante da química.

Diante do exposto, foram construídos os Quadros 4 e 5 conforme a seguir. No primeiro, apontam-se algumas convergências e divergências quanto às posições teóricas dos autores em relação ao tema analisado. No Quadro 5, propõe-se uma agenda mínima de problemas discutidos pela Filosofia da Química que se considerou relevante para o Ensino de Química.

Quadro 4 - Divergências e convergências quanto das posições teóricas dos autores em relação ao tema investigado.

Convergências	Autores	Divergências	Autores
Pluralismo Implícito	(ADÚRIZ-BRAVO; RIBEIRO, 2014; SCHUMMER, 2014; LASZLO, 2012)	Polissemia do termo modelos	(ADÚRIZ-BRAVO, 2001, 2012; BROWN, 1983, VAN FRAASSEN, 1980; LORENZANO, 2003; GIERE, 1999; NAGEL, 1961; HEMPEL, 1977) ERDURAN; MUGALOGU, 2014)
Aproximação entre filosofia, química e currículo.	(ADÚRIZ-BRAVO, LABARCA; LOMBARDI, 2014; KAYA; ERDURAN, 2001; SCERRI, 2002, 2001; RIBEIRO, 2014)	Reducionismo estrutural	(SCERRI, 2000b; 2007 LASZLO, 2012; KAYA; ERDURAN, 2011; LABARCA; LOMBARDI, 2005; LOMBARDI; CASTAGNINO, 2010).

Química como uma linguagem e seu ensino perspectivado como ensino de uma língua	(ADÚRIZ-BRAVO, 2001; LASZLO, 2012; RIBEIRO, 2014)	Explicação estrutural	(DEL RE, 2000; MAINZER, 1997; LABARCA; BEJARANO; EICHLER 2013; HENDRY, 1999, 2004, 2008, 2010; VAN BRAKEL, 1999; WEININGER, 1984).
Diagramacidade como estilo de pensamento químico	(GOODWIN, 2008; WOODY, 2000; RIBEIRO, 2014; SCHUMMER, 1999, 2003a)	-	-
Multiplicidade de modelos científicos	(ADÚRIZ-BRAVO 2001; LABARCA; 2006; MORGAN; MORRISON, 1999; OH; OH, 2011; SCHUMMER, 2014)	-	-
Dimensão pragmática dos modelos	(ADÚRIZ-BRAVO; LABARCA; LOMBARDI, 2014; BLACK, 1962; GIERE, 1999, 1992, 2004; WEISBERG, 2004; WOODY, 2004.)	-	-

Fonte: Elaboração própria.

Quadro 5 - Agenda mínima de problemas debatidos pela filosofia da química para o ensino de Química.

Explicação	Especificidade
Aproximações	Diagramacidade
Explicação Estrutural	
Instrumentalismo	
Polissemia	
Princípios	
Leis	
Reducionismo	
Teorias	
Visualização	
Modelos	

Fonte: Elaboração própria.

A Química é um campo científico marcado e inscrito em tensões, sendo que as principais discutidas pela Filosofia da Química estão explicitadas a seguir:

a) Modelo/Realidade: “[...] na química há uma supremacia da representação

sobre a realidade.” (BENSAUDE-VINCENT, 2009, p. 373).

b) Qualitativo/Quantitativo: necessidade das aproximações – a Química tem sido caracterizada dentro de um contexto difícil para a superação dos modelos qualitativos. Scerri (2000b) chama atenção dos educadores químicos no que diz respeito à manutenção do equilíbrio entre princípios unificadores e os aspectos aparentes mais descritivos e qualitativos. As leis químicas são vistas como aproximações. Para Ostrovsky (2005), a Filosofia da Química pode ser considerada uma filosofia das aproximações.

c) Estrutura/Composição: dois paradigmas em Química - no século XVIII, o paradigma era composicional. No século XIX, com o desenvolvimento da Química Orgânica, assim como das sínteses de compostos orgânicos, o conceito de estrutura passou a ser determinante para a identificação das espécies químicas. Como se pode verificar, esse conceito ocupa grande parte do debate da Filosofia da Química, sendo o foco principal da possibilidade de redução da Química à Mecânica Quântica.

d) Explicação/Intervenção: para Harré (2003), modelos são centrais na explicação química; para Ribeiro (2014, p.86) “[...] os modelos químicos não foram feitos para se referir ao real, mas para trabalhar com ícones representacionais que permitam intervir no real.”

e) Nomismo/Polissemia: outra característica relacionada com a ontologia química é sua polissemia. Esse é, na verdade, um problema tradicional na Filosofia da Química (VAN BRAKEL, 2012). O autor que mais discutiu essa temática foi Joseph Earley (2005, 2009).

f) Nomotética/Ideográfica: representação de uma única verdade. É preciso entender a pluralidade de pontos de vistas, ou seja, de diferentes explicações, mesmo que seja para o mesmo fenômeno. Para Laszlo (2012) e Schummer (2014), estudantes precisam compreender o pluralismo metodológico por meio de explicações em Química.

7 CONCLUSÃO

Neste trabalho, abordou-se o problema acerca das três perspectivas teóricas que buscam explicar a natureza da ligação covalente. Propõe-se, assim, a noção de modelo como possibilidade para as perspectivas de LEWIS, LV e OM. Para esse fim, são utilizados argumentos que buscam sustentar essa tese.

Nesse sentido, questionou-se: - Por que três perspectivas teóricas buscam explicar um mesmo fenômeno? Sob a ótica do realista ingênuo, essa convivência leva à perplexidade, pois não há como dizer, em princípio, ou pelo menos supor que uma explicação é "melhor" do que a outra. Há aqui um problema conceitual profundo sobre a natureza da ligação química.

Quanto às perspectivas, LV e OM, ambos têm uma forte "dívida" teórica para com a Mecânica Quântica e seu formalismo matemático; em particular, as duas perspectivas incorporam a equação de Schrödinger e, independente do tempo legal, em ambos os casos, o objetivo central é resolvê-las. Assim, embora sejam chamadas de duas "teorias" quânticas da ligação química, conforme constatado em livros didáticos estudados, propõe-se que sejam apenas dois modelos aproximados para resolver a equação de Schrödinger: descrições diferentes de um sistema molecular dentro do formalismo da Mecânica Quântica, duas formas incompatíveis de conceber uma molécula. Assim, a noção de modelo como mediador parece à adequada para esse caso (LOMBARDI; MARTINEZ GONZALEZ, 2012). Quanto ao aspecto de destacar o que uma função de onda representa, argumenta-se que ela nada mais é do que uma representação matemática abstrata do estado do sistema, tendo somente significado no contexto da Teoria Quântica.

Pode-se notar que as três perspectivas teóricas apresentam diferenças em relação aos seus aspectos teórico-conceituais e, sobretudo, em relação aos seus aspectos ontológicos. Nenhuma delas possui sua estrutura teórica para ser considerada uma teoria em sentido estrito, ou seja, nenhuma das perspectivas é completamente autônoma do ponto de vista teórico e, contudo, não são capazes de explicar completamente todos os aspectos da ligação covalente, embora seja válido destacar que cada uma deu sua contribuição. Sendo assim, a coexistência das perspectivas teóricas não atende às condições exigidas para a sua interpretação em termos ontologicamente pluralistas. Pelo contrário, tais perspectivas parecem ser

mais bem compreendidas como modelo, na medida em que ela postula estruturas não observáveis para realizar o comportamento empírico dos sistemas moleculares reais. Ainda se destaca que as perspectivas de LEWIS, LV e OM são descrições distintas de um mesmo fenômeno.

Retomando a noção de modelo/teoria a partir de Morgan e Morrison (1999), Rosenberg (2005) e Batista (1999) assumem que uma das principais diferenças entre esses dois termos é o nível de abrangência. Nesse sentido, consideram modelos como estruturas circunscritas nas teorias. Somado a isso, os modelos são mais limitados e devem ser utilizados em princípios gerais das teorias nos seus mais diversos casos. Como destacam Morgan e Morrison (1999), a palavra representação não se utiliza apenas em aqueles casos em que existe um tipo de exibição de aspectos visuais da entidade modelada, mas também como uma representação parcial que ao mesmo tempo “abstrai de” e “traduz de outra forma” a natureza dessa entidade.

Nesta pesquisa, sustenta-se que o caso ligação química serve bem para pensar sobre a coexistência de quatro explicações científicas distintas para um mesmo fenômeno. Dentro desse contexto, argumenta-se com em Adúriz-Bravo, Labarca e Lombardi (2014), segundo os quais a escolha entre os modelos vai depender dos fatores relevantes para cada situação ou do interesse que impulsiona o cientista em cada caso particular.

Ainda concorda-se com Schummer (2014, p.9) que a “[...] concorrência não é sobre quem está certo ou errado, mas sobre onde exatamente qual modelo é mais útil em explicações e previsões.” Para esse autor, o pluralismo metodológico pela utilização de modelos funciona, sendo indispensável em Química. Para ele, o pluralismo metodológico não é uma questão de gosto filosófico, mas inevitável nas ciências experimentais, podendo ser apreciada e entendida como uma epistemologia de pleno direito da ciência, cuja vantagem é a flexibilidade. Desse modo, Schummer (2014, p.10) comenta que “[...] se surgirem novos campos de interesse, novas questões ou problemas, mesmo graves de uma das abordagens atuais, a ciência pode ajustar de forma flexível.”

Argumentamos, amparados em Adúriz-Bravo, Labarca e Lombardi (2014) que não temos, em princípio, o modelo de um sistema real para a ligação química, mas uma “multiplicidade de modelos científicos” (OH; OH, 2011). Embora o entendimento da ligação química envolva três explicações, normalmente chamadas

de “teorias”, sustentamos que sejam entendidas como modelos – três representações da mesma realidade relacionada com modelos distintos. Frente ao problema químico investigado, acredita-se que a noção de modelo como mediador pode contribuir para minimizar as perplexidades decorrentes da coexistência de distintas descrições e explicações. Entende-se que trazer uma compreensão epistemológica acerca dos modelos, sobretudo como mediador epistêmico, pode ajudar licenciandos e professores formadores a entender a importância dos modelos para a Ciência, para a Filosofia, para o Ensino e, especialmente, para o entendimento da natureza da Química.

Nesse sentido, modelos não são mais ligados ao sentido lógico das teorias, mas tornam-se mediadores entre a teoria e a realidade (MORRISON; MORGAN, 1999; LOMBARDI; LABARCA, 2006; ADÚRIZ-BRAVO; LABARCA; LOMBARDI, 2014). Ainda, modelos não servem apenas para testar a teoria, mas para modificá-la; para explorar suas implicações; proporcionando um conhecimento específico e local, como uma ferramenta para experimentação (MORGAN; MORRISON, 1999; LOMBARDI, 2010).

Diante disso tudo, propomos que o Ensino de Química assuma três modelos, ao invés de “teorias”: Modelo de Lewis; Modelo da Ligação de Valência e Modelo do Orbital Molecular. Entendemos, assim como Schummer (2014), que é perfeitamente legítima a coexistência pacífica de diferentes modelos, mesmo que seja para o mesmo caso, uma vez que podem empregar diferentes aproximações ou dar ênfase a diferentes tipos de perguntas e aspectos.

Portanto, cremos que a noção de modelo, todavia, pode contribuir para sanar as perplexidades originadas da coexistência de diferentes descrições e explicações, apesar da incompatibilidade para um mesmo fenômeno químico.

REFERÊNCIAS

ADÚRIZ-BRAVO, A. A.; MEINARDI, E. Dos debates actuales en la investigación en la didáctica de las ciencias experimentales. **Didáctica de las Ciencias Experimentales e Sociales**, n. 14, p. 69-85, 2000.

ADÚRIZ-BRAVO, A. A. Integración de la epistemología en la formación del profesorado de ciencias. 2001. Tesis (Doctorado en Didáctica de las Ciencias Experimentales) - Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, 2001.

_____.; ESQUERDA-AYMERICH, M. Um modelo de modelo científico para ensino de ciências naturais. **Revista Eletrônica de Pesquisa em Educação Ciência**, Edição Especial 1, n. 4, p. 40 – 49, 2009.

_____. Hacia una didáctica de las ciencias experimentales basada en modelos. En: Congrès Internacional de Didàctiques, 2., 2010, Girona. **Llibre d'actes...**, n. 248, Girona: Universitat de Girona, 2010. CD-ROM. Eds: L. Álvarez, R. Rickenmann y J. Vallès.

_____. Concepto de modelo científico: una mirada epistemológica de su evolución. En: GALAGOVSKY, L. (Coord.). **Didáctica de las ciencias naturales**: el caso de los modelos científicos. Buenos Aires: Lugar Editorial, 2011. p. 141-161.

_____. A 'Semantic' view of scientific models for science education. **Science & Education**, v. 22, n. 7, p.1593-1611, 2012.

_____. Algunas características clave de los modelos científicos relevantes para la educación química. **Educación Química**, Ciudad de México, v. 23, p. 248 – 256, 2012.

_____.; LABARCA, M.; LOMBARDI, O. Modelos como mediadores: el caso del enlace químico. En: MERINO, C.; ADÚRIZ-BRAVO, A.; ARELLANO, M. (Ed.). **Avances en didáctica de la Química**: modelos y lenguajes. Valparaíso, Chile: ediciones Universitarias de Valparaíso, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, 2014. p. 37-49.

AKERROYD, M. The Foundations of Modern Organic Chemistry: the rise of the hughes and ingold theory from 1930 through 1942. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 2, n. 2, p. 99-125, 2000.

ARIZA, Y.; LORENZANO, P.; ADÚRIZ-BRAVO, A. Dificultades en la introducción de la “familia semántica” a la didáctica de las ciencias naturales. **Revista Latinoamericana de Estudios Educativos**, Colombia, v. 6, n. 1, p. 59-74, 2010.

ATKINS, P.W.; JONES, L. **Principios de química**: cuestionando a vida moderna e o meio ambiente. 3. ed. Porto Alegre: Bookman, 2006. 965 p.

AUSUBEL, D. P.; NOVAK, J. D.; HANESIAN, H. **Psicología educativa un punto de vista cognoscitivo**. México: Trillas, 1976.

BADER, R. F. W. **Atoms in molecules**: a quantum theory. New York: Oxford, 1990.

BALL, P. Beyond the bond. **Nature**, n. 469, p. 26-28, 2011.

BARDIN, L. **Análise de conteúdo**. Lisboa: Edições 70, 1977.

BATISTA, I. L. **A teoria universal de Fermi**: da sua formulação inicial à reformulação V-A. 1999. Tese (Doutorado em Filosofia da Ciência). Departamento de Filosofia, Faculdade de Filosofia, Letras e Ciências Humanas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999.

BENSAUDE-VINCENT, B. **Matire penser, essais d'histoire et de philosophie de la chimie**. Paris: l'Universit Paris Ouest, 2008.

_____. The chemists style of thinking. **Ber.wissenschaftsgesch**, n.32, p. 365–378, 2009.

BERSON, J.A. Fundamental theories and their empirical patches. **Foundations of chemistry**, New York, v. 10, n. 3, p. 147-156, 2008.

BIRK, J. P.; KURTZ, M. J. Effect of experience on retention and elimination of misconceptions about molecular structure and bonding. **Journal of Chemical Education**, v. 76, n. 1, p. 124-128, 1999.

BLACK, M. **Models and metaphors**: studies in language and philosophy. Ithaca and London: Cornell UP, 1962.

BOYD, R. Realism, underdetermination and a causal theory of evidence. **Nous**, n.1, v. 7, p.1-12, 1973.

BRADY, J.; HUMISTON, G. E. **Química geral**. Rio de Janeiro, RJ: Livros Técnicos e Científicos, 1986. Vol. I e II.

BROCK, William H. **The Chemical Tree**. New York: W. W. Norton, 2000.

BROWN, H. I. **La nueva filosofía de la ciencia**. Madrid: Tecnos, 1983.

BROWN, T. L. **Making Truth**: Metaphor in Science. Urbana/Champaign: University of Illinois, 2003.

_____. LEMAY Jr., H. E.; BURSTEN, B. E.; BURDGE, J. R. **Química**: a ciência central. 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

BUNGE, M. Demarcating Science from Pseudoscience. **Fundamenta Scientiæ**, v. 3, n. 3 e 4, p. 369-388, 1982.

_____. Exploring the world. In: _____. **Treatise on basisc philosophy**. Dordrecht: D. Reidel, 1983. v. 5.

_____. **Racionalidad y realismo**. Madrid: Alianza, 1985.

_____. **Seudociencia e ideologia**. Madrid: Alianza, 1985.

CALDIN, E. F. **The structure of Chemistry in relation to the philosophy of science**. London; New York: Sheed e Wards, 1961.

_____. The structure of chemistry in relation to the philosophy of science. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 8, n. 2, p. 103-121, 2002.

CARTWRIGHT, N. **How the laws of physics lie**. Oxford: Oxford University, 1983.

_____. **The dappled world: a study of the boundaries of science**. Cambridge, UK: Cambridge University, 1999.

CHAGAS, A. P.; DAVANZO, C. U. Gilbert Newton Lewis e a revolução dos pares eletrônicos. **Química Nova**, v. 16, n. 2, p. 152-154, 1993.

CHALMERS, A. **Que es esa cosa llamada ciência?** Madrid: Siglo XXI, 1984. 2ª Edición original en inglês de 1982.

CHAMIZO, J. A. Los modelos de la química. **Educación química**, México, v.17, p. 476-482, 2006.

_____. Una tipología de los modelos para la enseñanza de las ciencias. **Revista Eureka de Enseñanza y Divulgación de la Ciencia**, v. 7, n. 1, p. 26-41, 2010.

CHANG, R. **Química**. 5. ed. Lisboa: Mc Graw Hill, 1994.

CHIBENI, S. N. Descartes e o realismo científico. **Reflexão**, n. 57, p.35-53, 1993.

CINTAS, P. On the Origin of Tetrahedral Carbon: a case for Philosophy of Chemistry? **Foundations of Chemistry**, New York, v. 4, n. 2, p.149-161, 2002.

CLARK, A. Being there: Putting Brain, Body, and world together again. Cambridge, MA: MIT, 1997.

CRESWELL, J. W. **Projeto de pesquisa: métodos qualitativo, quantitativo e misto**. 2a ed. Trad. L. de O. Rocha, Trad. Porto Alegre: Artmed, 2007. Obra original publicada em 2003.

DELATTRE, P. Método-Teoria/Modelo. In: ENCICLOPÉDIA Einaudi. Lisboa: Imprensa Nacional Casa da Moeda, 1992. Vol. 21, p. 223-287.

DEL RE, G. Ontological status of molecular structure. **Hyle - An International Journal for the Philosophy of Chemistry**, Berlin, v.4, n.2, p.81-103, 1998.

_____. Models and Analogies in Science. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 6, n. 1, p. 5-15, 2000.

_____. Reaction Mechanisms and Chemical Explanation. **Annals N.Y. Acad. Sci**, v. 988, Issue 1, p.133-140, 2003. Ed.: J. Earley, J. Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy.

DÍEZ, J.A.; LORENZANO, P. (Ed.). **Desarrollos actuales de la metateoría estructuralista: problemas y discusiones**. Quilmes, Argentina: Universidad Nacional de Quilmes; Zacatecas, México: Universidad Autónoma de Zacatecas; Tarragona and Reus, Espanha: Universitat Rovira i Virgili, 2002.

DÍEZ, J. A.; MOULINES, U. **Fundamentos de filosofía de la ciencia**. 2ª edición. Barcelona: Ariel, 1999.

DIRAC, P. Quantum mechanics of many: electron systems. **Proceedings of the Royal Society**, A 338, p. 714 - 733, 1929.

DUTRA, L. H. **Verdade e investigação**: o problema da verdade na teoria do conhecimento. São Paulo: EPU, 2001.

EARLEY, J. (Ed.). Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy. **Annals N.Y. Acad. Sci.**, v. 988, Issue 1, p. ix–xiii, 1–376, 2003.

_____. Why there is no salt in the sea. **Foundations of Chemistry**, New York, v.7, n.1, p. 85–102, 2005.

_____. How chemistry shifts horizons: element, substance, and the essential. **Foundations of Chemistry**, New York, v.11, n. 2, p. 65-77, 2009.

_____. A New Idea of Nature for Chemical Education. **Science & Education**, New York, on line first, 29 jul., 2012.

ERDURAN, S. Philosophy of Chemistry: an emerging field with implications. **Science & Education**, New York, v.10, p. 581–593, 2001.

_____.; ADÚRIZ-BRAVO, A.; NAAMAN, R. M. Developing epistemologically empowered teachers: examining the role of philosophy of Chemistry in teacher education. **Science & Education**, New York, v.16, n. 9, p. 975-989, 2007.

_____.; MUGALOGLU, E. Philosophy of chemistry in chemical education. In: MATTHEWS, M. (Ed.). **International Handbook of Research on History, Philosophy and Sociology of Science Teaching**. Springer, 2014.

FAYERSHTEIN, M. G. The evolution of the theory of valency. In: KUZNETSOV, V. I. (Org.). **Theory of valency in progress**. Tradução para o inglês de Alexander Rosinkin. Moscou: Mir Publishers, 1980. p. 34-73.

FERNANDEZ, C.; MARCONDES, M. E. R. Concepções dos estudantes sobre ligações químicas. **Química Nova na Escola**, v. 24, p. 20-24, 2006.

FISCHER, G. The autonomy of models and explanation: anomalous molecular Rearrangements in early twentieth-century physical organic chemistry. **Studies in History and Philosophy of Science**, v. 37, n. 4, p. 562-584, 2006.

_____. Explaining, Explanation in Chemistry. **Annals N.Y. Acad. Sci.**, v. 988, Issue 1, p. 16-21, 2003. Ed.: J. Earley, J. Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy.

FRANCOEUR, E. Beyond dematerialization and inscription: Does the materiality of molecular models really matter. **Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 6, n.1, p. 63-84, 2000.

FRENCH, S. **Ciência**: conceitos-chave em Filosofia. Porto Alegre: Artmed, 2009.

GALAGOVSKY, L. R. **Redes conceptuales**: memoria, comunicación y aprendizaje. Buenos Aires: Editorial Lugar, 1996.

GAVROGLU, K.; SIMÕES, A. From Physical Chemistry to Quantum Chemistry: How Chemists Dealt with Mathematics. **Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 18, n. 1, p. 45-69, 2012.

GIERE, R. N. **Explaining Science**: a cognitive Approach. Chicago: University of Chicago, 1988.

_____. **Cognitive models of science**. Minneapolis: University of Minnesota, 1992a.

_____. **La explicación de la ciencia**: un acercamiento cognoscitivo. México: Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, 1992b. Edición original en inglês de 1988.

_____. Using models to represent reality. En: MAGNANI, L.; NERSESSIAN, N. J.; THAGARD, P. (Ed.). **Model-based reasoning in scientific discovery**. New York: Kluwer Academic Publishers/Plenum, 1999. p. 41-57.

_____. Del realismo constructivo al realismo perspectivo. **Enseñanza de las Ciencias**, número extra, p. 9 -13, 1999a.

_____. Un nuevo marco para enseñar el razonamiento científico. **Enseñanza de las Ciencias**, número extra, p. 63-70, 1999b.

_____. Como os modelos são usados para representar a realidade. **Philosophy of Science**, v. 71, p. 242-52, 2004.

GILBERT, J. Models in Science and Science Education. In: _____. (Ed.). **Exploring Models and Modelling in Science and Technology Education**: contribution From the MISTRE Group. Reading: The College of Estate Management, 1997.

GILLESPIE, R. J. Teaching Molecular Geometry with the VSEPR Model. **Journal of Chemical Education**, New York, v. 81, n. 3, p. 298 - 304, 2004.

GOODWIN, W. M. Explanation in organic chemistry. **Annals N.Y. Acad. Sci.**, v. 988, Issue 1, p. 141–153, 2003. Ed.: J. Earley, J. Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy.

_____. Natural Kinds, Explanation, and Essentialism in Chemistry. **Annals N.Y. Acad. Sci.**, v. 988, Issue 1, p. 59-70, 2003a. Ed.: J. Earley, J. Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy.

_____. Structural formulas and explanation in organic chemistry. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 10, n. 2, 2008.

_____. Implementation and innovation in total synthesis. **Foundations of Chemistry**, New York, v.10, n.3, p. 177-186, 2008a.

_____. Visual representations in science. **Philosophy of Science**, Chicago, v.76, n.3, p.372-390, 2009b.

_____. How do structural formulas embody the theory of organic chemistry? **Philosophy of Physical Science**, v. 61, n. 3, p. 621-633, 2010.

GOODMAN, N. **Languages of art**: an approach to a theory of symbols. Indiana: Hackett Publishing Company, 1976.

GRECA, I.; MOREIRA, M.A. Models mentales y aprendizaje de física en electricidad y magnetismo. **Enseñanza de las Ciencias**, v. 16, n. 2, p. 289 – 303, 1998.

GROSS, A. **The rhetorical of science**. Cambridge: Havard University, 1990.

GUGLIOTTI, M. Irving Langmuir: o milagre da ciência. **Química Nova**, v. 24, n.4, p. 568-572, 2001.

GUTIÉRREZ, R. Polisemia actual del concepto “modelo mental”: Consecuencias para la investigación didáctica. **Investigações em Ensino de Ciências**, v. 10, n. 2, p. 209-226, 2005.

HACKING, I. **Representing and Intervening**. Cambridge, UK: Cambridge University, 1983.

_____. **Representar e intervir**: tópicos introdutórios de filosofia da ciência natural. Rio de Janeiro: Eduerj. 2012.

HANSON, N.R. **Patterns of discovery**: an inquiry into the Conceptual Foundations of Science. Cambridge: Cambridge University, 1958.

HARRÉ, R. Foreword. **Annals N.Y. Acad. Sci.**, v. 988, Issue 1, p. ix-x, 2003a. Ed.: J. Earley, J. Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy.

HEMPEL, C. G. Formulation and formalization of scientific theories: a summary – abstract. In: SUPPE, F. (Ed.). **The structure of scientific theories**. Urbana/ Chicago: University of Illinois, 1977. p. 244-65.

HENDRY, R. F. Molecular models and the question of physicalism. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 5, n. 2, p. 143-60, 1999.

_____. The physicists, the chemists, and the pragmatics of explanation. **Philosophy of Science**, v. 71, p. 1048-59, 2004.

_____. Elements, compounds and other chemical kinds. **Philosophy of Science**, v. 73, p. 864-875, 2006.

_____. Two conceptions of the chemical bond. **Philosophy of Science**, v. 75, p. 909-920, 2008.

_____. Ontological reduction and molecular structure. **Studies in History and Philosophy of Modern Physics**, v. 41, p. 183-191, 2010.

HESSE, M. B. **Models and analogies in science**. Notre Dame, EUA: University of Notre Dame, 1966

HETTEMA, H. Explanation and theory foundation in quantum chemistry. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 11, p. 145 -174, 2009.

HODSON, D. (1988). Toward a philosophically more valid science curriculum. **Science Education**, v. 72, n. 1, p. 19 -40, 1988.

HOFFMANN, R. How Should Chemists Think? **Scientific American**, p. 66-73, 1 feb. 1993.

_____. Thoughts on aesthetics and visualization in chemistry. **Hyle International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 9, n. 1, Special Issue, p.7-10, 2003.

_____. O mesmo e o não-mesmo. São Paulo: Unesp, 2000. Também publicado no **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, n. 9, p. 7-1, 2007.

HURST, M. O. How we teach molecular structure to Freshmen. **Journal of Chemical Education**, v. 79, n. 6, p. 763-764, 2002.

IZQUIERDO - AYMERICH, M. Bases epistemològiques del curriculum de ciències. **Educar**, v. 17, p. 69-90, 1999a.

_____. **Memoria del proyecto docente e investigador**. Bellaterra: Universidade Autònoma de Barcelona, 1999b.

_____. La enseñanza de los componentes prácticos y axiológicos de los conceptos químicos. In: CABRÉ, M. T.; BACH, C. (Ed.). **Coneixement, llenguatge i discurs especialitzat**. Barcelona: Institut Universitari de Lingüística Aplicada (UFP)/Documenta Universitària, 2012.

JACOB, C. Analysis and synthesis: interdependent operations in chemical language and practice. **Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 7, n.1, p. 31- 50, 2001.

JENSEN, W. B. The origin of the metallic Bond. **Journal of Chemical Education**, v. 86, p. 278-279, 2009.

JUSTI, R. La enseñanza de ciencias basada en la elaboración de modelos. **Enseñanza de las Ciències**, v. 2, p. 173-184, 2006.

_____.; GILBERT, J. Models and modelling in chemical education. In: GILBERT, J. K. et al. **Chemical Education: towards research-based practice**. Dordrecht: Kluwer, 2002.

KAYA, E.; ERDURAN, S. Integrating epistemological perspectives on Chemistry in chemical education: the cases of concept duality, chemical language and structural explanations. **Science & Education**, Lyon, France, v. 22, n. 7, p. 1741–1755, 2013. Paper presented at the European Science Education Research Association (ESERA) Biannual Conference, Lyon, France, 2011.

KEKULÉ, 1867 apud MIERZECKI. **The historical development of chemical concepts**. Varsóvia: Polish Scientific Publishers; Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1991

KLEIN, U. (Ed.). **Tools and modes of representation in the laboratory sciences**. Dordrecht: kluwer, 2001.

KOTZ, J. C.; TREICHEL, P. M.; WEAVER, G. C. **Química geral e reações químicas**. 6. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

KUHN, T. S. **A estrutura das revoluções científicas**. São Paulo: Perspectiva, 2009.

KUKLAS, A. Scientific realism, scientific practice and the natural ontological attitude. **British Journal of the Philosophy of Science**, v. 45, p. 955-975, 1994.

KRAPAS, S. et al. Modelos: uma análise de sentidos na literatura de pesquisa em ensino de ciências. **Revista Investigações em Ensino de Ciências**, v. 2, n. 3, p. 185-207, 1997.

LABARCA, M. La filosofía de la química y su impacto en la educación en química. **Educación em la Química**, v.12, n. 2, p. 59-71, 2006.

_____. Filosofía de la química: a poco más de diez años de su nacimiento. In: MARTINS, R. A. et al. (Org.). **Filosofia e história da ciência no Cone Sul**. Campinas: AFHIC, 2010. p. 414-422.

_____.; LOMBARDI, O. The ontological autonomy of the chemical world. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 7, n. 2, p. 125-148, 2005.

_____. Why orbitals do not exist?. **Foundations of Chemistry**. New York, v.12, n. 2, p. 149-157, 2010.

LOMBARDI, O.; LABARCA, M. The Philosophy of Chemistry as a New Resource for Chemistry Education. **Journal of Chemical Education**, Washington, v. 84, n.1, p. 187-192, 2007.

LABARCA, M.; LASTIRI, M. Acerca del correlato ontológico de la noción de enlace químico: realismo tradicional, realismo pluralista y estructuralismo. In: CONGRESO IBEROAMERICANO DE FILOSOFÍA DE LA CIENCIA Y LATECNOLOGÍA, 3., 2010, Buenos Aires. **Anais eletrônicos...** Buenos Aires: Universidad Nacional de Tres Febrero sede Centro Cultural Borges, 2010. p. 827 - 829.

LABARCA, M.; BEJARANO, N. R. R.; EICHLER, M. L. Química e filosofia: rumo a uma frutífera colaboração. **Química Nova**, v. 36, n. 8, p.1-17, 2013.

LASZLO, P. Chemical Analysis as Dematerialization. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 4, n. 1, p. 29-38, 1998.

_____. Playing with Molecular Models. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 6, n. 1, p. 85-97, 2000.

_____. Towards teaching chemistry as a language. **Science & Education**, New York, online first, 23 mar. 2012.

LEMES, A. F. G. **Aspectos filosóficos e educacionais da química: investigando as concepções de doutorandos em química**. 2013. 179f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências, modalidade Química) – Universidade de São Paulo. Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências, São Paulo, 2013.

LEWIS, G. N. The atom and the molecule. **Journal of the American Chemical Society**, v. 38, n. 4, p. 762-785, 1916.

_____. Valence and the structure of atoms and molecules. New York: Chemical Catalog Co, 1923. Reprinted, New York: Dover, 1966.

LOMBARDI, O. Los modelos como mediadores entre teoría y realidad. In: GALAGOVSKY, L. (Ed.). **Modelos científicos**. Buenos Aires: Editorial Lugar, 2010. p. 83- 4.

_____. La noción de modelo en ciencias. **Educación en Ciencias**, Buenos Aires, v. 2, n. 4, p. 5–13, 1998.

_____.; LABARCA, M. The ontological autonomy of the chemical world: A Response to Needham. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 8, p. 81-92, 2006.

_____.; LABARCA, M. The philosophy of chemistry as a new resource for chemical education. **Journal of Chemical Education**, v. 84, n. 1, p. 187-192, 2007.

_____.; CASTAGNINO, M. Matters are not so clear on the physical side. **Foundations of Chemistry**, New York, v.12, n. 2, p. 159-166, 2010.

_____.; MARTÍNEZ GONZÁLEZ, J. Entre mecánicacuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica?. **Scientiae Studia**, v. 10, n. 4, p. 649-670, 2012.

LORENZANO, P. Debe ser excluida la concepción estructuralista de las teorías de la familia semanticista? una crítica a la posición de Frederick Suppe. **Filosofía de la ciencia e Historia de la Ciencia**, v. 9, n. 9, p. 282-290, 2003.

LOSEE, J. **Introducción histórica a la filosofía de la ciência**. Madrid: Alianza, 1997. Edición original en inglés de 1972.

MAINZER, K. Symmetry and complexity: fundamental concepts of research in Chemistry. **Hyle - An International Journal for the Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 3, p. 29-49, 1997.

_____. Computational models and virtual reality: new perspectives of research in Chemistry. **Hyle - An International Journal for the Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 5, n. 2, p. 117-126, 1999.

MASTERTON, W. L.; SLOWINSKI, E. J.; STANITSKI, C. L. **Princípios de Química**. 6. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2011.

MCLNTYRE, L. The emergence of the philosophy of Chemistry. **Foundations of Chemistry**, New York, n. 1, p. 57-63, 1999.

MELO, M. R. **Estrutura atômica e ligações químicas**: uma abordagem para o ensino médio. 2002. Dissertação (Mestrado em Química Inorgânica), Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.

MORGAN, M. S.; MORRISON, M. (Ed.). **Model as mediators**: perspectives on natural and social science. Cambridge, UK: Cambridge University, 1999.

MORRISON, M. Modelling nature between physics and the physical world. **Philosophia Naturalis**, n. 35, p. 65-85, 1998.

_____. Approximating the real: the role of idealizations in physical theory. **Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities**, v. 86, n. 1, p. 145-172, 2005.

MUSGRAVE, A. Realism versus constructive empiricism. In: CHURCHLAND, P. M.; HOOKER, C. A. **Images of Science**. Chicago: Chicago University, 1985. p. 197-221.

NAGEL, E. **The structure of science**. Nova York: Harcourt, 1961.

OKI, M. C. M. Controvérsias sobre o atomismo no século XIX. **Química Nova**, v. 32, n. 4, p.1072-1082, 2009.

OSBORNE, J. Promoting argument in the Science classroom: a rhetorical perspective. **Canadien Journal of Science, Mathematics and Technology Education**, v. 1, n. 3, p. 271-290, 2001.

OSTROVSKY, V. N. On recent discussion concerning quantum justification of the periodic table of the elements. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 7, n.3, p. 235-239, 2005.

PAPINEAU, D. Why supervenience?. **Analysis**, v. 49, n. 2, p. 66-71, 1990.

PAULING, L. The nature of the chemical bond: application and results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules. **Journal American Chemical Society**, v. 53, p. 367, 1931.

_____. **Unione químicas y la estructura de moléculas e cristales**: uma introducción a La química estructural moderna. Buenos Aires: Kapelusz, 1965.

PENHA, A. F. **Valência: adjetivo ou substantivo?** Uma visão de professores, de livros didáticos e de estudantes do curso de licenciatura em química da Universidade

Federal da Bahia. 2005. Dissertação (Mestrado em Ensino, Filosofia e História das Ciências), Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2005.

PERINI, L. The truth in pictures. **Philosophy of Science**, v. 72, n. 1, p. 262-285, 2005.

PESSOA JÚNIOR, O. A representação pictórica de entidades quânticas na Química. **Química Nova na Escola**, caderno temático 7, 2007.

PETERSON, R. F.; TREAGUST, D. F. Grade-12 students' misconceptions of covalent bonding and structure. **Journal of Chemical Education**, v. 66, n. 6, p. 459-460, 1989.

PETERSON, R. F.; TREAGUST, D. F.; GARNETT, P. Development and application of a diagnostic instrument to evaluate grade-11 and -12 students' concepts of covalent bonding and structure following a course of instruction. **Journal of Research in Science Teaching**, v. 26, p. 301- 314, 1989.

OH, P. S.; OH, S. J. What teachers of science need to know about models: an overview. **International Journal of Science Education**, v. 33, n. 8, p. 1109-1130, 2011.

PICKERING, A. Living in the read world. En: GOODING, D.; PINCH, T.; SCHAFFER, S. (Ed.). **The use of the experiment**. Cambridge, UK: Cambridge University, 1989.

PRIMAS, H. Chemistry, Quantum mechanics and reductionism: perspectives. In: _____. **Theoretical Chemistry**. New York: Berlin–Heidelberg, 1981.

_____. **Chemistry, quantum mechanics, reductionism: perspectives in theoretical chemistry**. Berlin: Springer-Verlag, 1983.

_____. Kann chemie auf physik reduziert werden? **Chemie in unserer Zeit**, v. 19, n. 5, p. 160-166, 1985.

PUTNAM, H. What is mathematical truth. *Historia mathematica*, v. 2, p. 529-533, 1975. In: _____. **Mathematics, matter and method**. Cambridge: Cambridge University, 1975. (Philosophical Papers, v. 1).

_____. **Reason, truth and history**. Cambridge: Cambridge University, 1981.

QUAGLIANO, J. V.; VALLARINO, L.M. **Química**. 3. ed. Rio de Janeiro, RJ: Guanabara Dois, 1979.

RIBEIRO, M. A. P. **Integração da filosofia da química no currículo de formação inicial de professores**: contributos para uma filosofia no ensino. 2014. Tese (Doutorado em Educação, Teoria e Desenvolvimento Curricular) - Universidade de Lisboa, Instituto de Educação, Lisboa, 2014.

_____. et al. Campo de problemas sobre a linguagem química debatidos pela filosofia da química. In: ENCONTRO NACIONAL DE PESQUISA EM EDUCAÇÃO EM CIÊNCIAS, 10., 2015, Águas de Lindóia, SP. **Anais...**, Águas de Lindóia, SP: ENPEC, 2015. v. 1. p. 1-8.

ROSEMBERG, A. **Darwinism in philosophy, social science and policy**. Cambridge: Cambridge University, 2000.

_____. **Philosophy of science**: a contemporary introduction. 2. ed. Routledge, London: Psychology Press, 2005.

RUSSELL, J. B. **Química geral**. 2. ed. São Paulo: Makron Books, 1994. 2v.

SAMPIERI, R. H.; COLLADO, C. F.; LUCIO P. B. **Metodología de la investigación**. México: McGraw-Hill, 1996.

SCERRI, E. R. Emergence and application of philosophy of Chemistry in chemistry education. **School Science Review**, v. 81, p.85–87, 2000.

_____. Philosophy of chemistry: a new interdisciplinary field? **Journal of Chemical Education**, v. 77, n. 4, p. 522-525, 2000b.

_____. Editorial 10. **Foundations of Chemistry**. New York, v. 10, n. 4, p.1- 4, 2002.

_____. Philosophical confusion in chemical education research. **Journal of Chemical Education**, v. 80, n. 5, p. 468-474, 2003.

_____. On the nature of chemistry. **Educacion Quimica**, v. 10, n. 2, p.74-78, 2003b.

_____. The ambiguity of reduction. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 13, n. 2, p. 67-81, 2007.

_____.; MCINTYRE, L. The case for Philosophy of Chemistry. **Synthese**, v. 111, p. 213 – 232, 1997.

SCHUMMER, J. Towards a philosophy of Chemistry. **Journal for General Philosophy of Science**, v. 28, p. 307–335, 1997.

_____. The chemical core of Chemistry I: a conceptual Approach. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 4, n. 2, p. 129 -162, 1998.

_____. Coping with the growth of chemical knowlege: chalenges for Chemistry documentation, Education and working chemists. **Educación Química**, v.10, n. 2, p. 92- 101, 1999.

_____. Models in Chemistry, part 1: models in Theoretical Chemistry. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Karlshure, v. 5, n. 2, 2000a.

_____. Models in Chemistry, part 2: molecular models. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Karlshure, v. 6, n. 1, p. 3-4, 2000b.

_____. Models in Chemistry, part 3: modeling Complex Systems. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Karlshure, v. 6, n. 2, p. 99-100, 2000c.

_____. The notion of nature in Chemistry. **Studies in History and Philosophy of Science**, v. 34, p. 705-736, 2003a.

_____. Editorial: Substances versus Reactions. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v.10, n.1, 2004.

_____. The philosophy of Chemistry: from infancy towards maturity. In: BAIRD, D.; SCERRI, E.; MACINTYLEE, L. (Ed.). **Philosophy of Chemistry**: synthesis of a new discipline. Dordrecht: Springer, 2006. p. 19-39. Boston Studies in the Philosophy of Science, v. 242).

_____.; SPECTOR, T. I. The visual image of Chemistry: perspectives from the history of art and science. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 13, n. 1, p. 3-41, 2007.

_____. The methodological pluralism of chemistry and its philosophical implications. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, p. 1-12, 2014.

_____. The preference of models over laws of nature. **European Review**, v.22, n.1, p. 87-101, 2014.

SILVA, M. R. da. Realismo e anti-realismo na Ciência: aspectos introdutórios de uma discussão sobre a natureza das teorias. **Revista Ciência e Educação**, v. 5, n. 1, p. 7-13, 1998.

SJÖSTRÖM, J. The discourse of Chemistry (and Beyond). **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 13, n. 2, p. 83-97, 2007.

SLATER, J. C. Directed valence in polyatomic molecules. **Physical Review**, v. 37, n. 5, p. 481- 489, 1 march 1931.

SPECTOR, T. I. The aesthetics of molecular representation: from the empirical to the constitutive. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 5, n.3, p. 215-236, 2003.

STEIN, R. Towards a process philosophy of Chemistry. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v.10, n.1, p. 5-22, 2004.

SUKUMAR, N. The chemist's concept of molecular structure. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 11, n. 1, p. 7-20, 2009.

SUPPE, F. **The structure of scientific theories**. Urbana/Chicago: University of Illinois, 1974. 1977.

_____. 2nd ed. Urbana/Chicago: University of Illinois, 1977. p. 244-265.

_____. **The semantic conception of theories and scientific realism**. Urbana/Chicago: University of Illinois, 1989.

_____. Understanding scientific theories: an assessment of developments, 1969 – 1998. **Philosophy of Science**, v. 67, p.112-115, 2000.

TOMASI, J. Towards 'chemical congruence' of the models in theoretical chemistry. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin v. 5, p. 79-115, 1999.

TOMASELLO, Michael. **The cultural origins of human cognition**. Cambridge, MA: Harvard University, 1999.

TONTINI, A. Developmental aspects of contemporary chemistry. Some philosophical reflections. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 5, p.57-76, 1999.

TRINDLE, C. Entering Modeling Space: an Apprenticeship in molecular modeling. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 5, p.145-160, 1999.

_____. The quantum-mechanical view of molecular-structure and the shapes of molecules. **Israel Journal of Chemistry**, v. 19, n. 1-4, p. 47-53, 1980.

VAN BRAKEL, J. On the neglect of the philosophy of Chemistry. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 1, p.111–174, 1999.

_____. **Philosophy of Chemistry**: between the manifest and the scientific image. Leuven: Leuven University, 2000.

_____. On pré-history of philosophy of Chemistry. In: INTERNATIONAL SOCIETY FOR THE PHILOSOPHY OF CHEMISTRY - SUMMER SYMPOSIUM, 2012, Leuven, Bélgica.

VAN FRAASSEN, B. C. **The scientific image**. Oxford: Clarendon, 1980.

_____. **Symmetries and laws of nature**. Oxford: Clarendon, 1989.

_____. **A imagem científica**. Trad. Luiz Henrique de Araújo Dutra. São Paulo: Edunesp: Discurso Editorial, 2007.

VEMULAPALLI, G. K. Theories of the chemical bond and its true nature. **Foundations of Chemistry**, New York, v.10, n. 3, p.167-176, 2008.

VIHALEMM, R. Are laws of nature and scientific theories peculiar in Chemistry? Scrutinizing Mendeleev's Discovery. **Foundations of Chemistry**, New York, v. 5, p. 7-22, 2003.

_____. Philosophy of Chemistry and the image of science. **Foundations of Science**, v. 12, n. 3, p. 223–234, 2007.

_____. The autonomy of Chemistry: old and new problems. **Foundations of Chemistry**, New York, v.13, n. 2, p. 97–107, 2011.

WEININGER, S. J. The molecular structure conundrum: can classical Chemistry be reduced to Quantum Chemistry? **Journal of Chemical Education**, n.61, p. 939–944, 1984.

WEISBERG, M. Qualitative theory and chemical explanation. **Philosophy of Science**, v. 71, n. 5, p. 1071-1081, 2004.

_____. Challenges to the structural conception of chemical bonding, **Philosophy of Science**, v. 75, p. 932-46, 2008. 20th Biennial Mtg, Vancouver: PSA Symposia

WITTGENSTEIN, L. **Investigações filosóficas**. México: Instituto de Investigaciones Filosófico/UNAM, 1988. Original em alemão de 1954.

WOODY, A. I. Putting quantum mechanics to work in chemistry: the power of diagrammatic representation. **Philosophy of Science**, Chicago, v. 67, p. 612-27, 2000.

_____. More telltale signs: What attention to representation reveals about scientific explanation. **Philosophy of Science**, Chicago, v. 71, n. 5, p.780 – 793, 2004.

WOOLLEY, R. G. Must a molecule have a shape? **Journal of the American Chemical Society**, v.100, p.1073–1078, 1978.

_____. The molecular structure conundrum. **Journal of Chemical Education**, n. 62, p. 1082–1085, 1985.

ZEIDLER, P. The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure. **Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry**, Berlin, v. 6, n. 1, p. 17- 34, 2000.