

# O quê é Química Moderna?

## Introdução à Química Moderna

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

### 1 Uma pequena história do interesse humano por transformar a matéria.

Isaac Newton, um dos pais da mecânica clássica, afirmou em 1675 que se viu “mais longe, foi por estar sobre os ombros de gigantes.” De fato, o conhecimento científico é construído passo a passo com base em contribuições de cientistas do passado e do presente e a Química, como área das ciências naturais, não teve um início diferente: desde o surgimento da espécie, humanos modificam materiais para sobreviver. A diferença entre nossos antepassados e nós é que os processos usados para modificar a matéria se tornaram cada vez mais sofisticados. Em aproximadamente 4000 AC já sabíamos forjar metais para produzir ferramentas agrícolas e armas para a guerra. Na Idade do Bronze, a humanidade descobriu que alguns metais – Sn, Pb e Cu – poderiam ser extraídos simplesmente pelo aquecimento de minerais em uma forja quente o suficiente. Na China durante a Idade do Ferro, grandes inovações como alto-forno e martinets hidráulicos contribuíram para que a civilização local florescesse. Hoje imprimimos metais e plásticos, atingimos temperaturas estelares e sub espaciais, mas somente atingimos esse ponto após a passagem de milênios, com o amadurecimento do entendimento de o que é a matéria e como ela se comporta.

A **teoria atomística** surgiu primeiramente na Antiguidade Clássica, quando os filósofos Demócrito e Leucipo propuseram que toda a matéria seria composta de pequenas partículas indivisíveis a quem chamaram de **átomos**. Demócrito afirmou que a existência de átomos era uma consequência da impossibilidade de se dividir a matéria indefinidamente. Por muitos anos, entretanto, a noção da existência de átomos foi negligenciada em favor de uma visão aristotélica da matéria. Segundo Aristóteles, átomos não existiam porque sua existência implicava na existência de um vazio, o que ele negava. A matéria, então, deveria ser contínua. Em meio às diversas discussões sobre a natureza da matéria, o estudo das transformações da matéria ficou, em grande parte, nas mãos de alquimistas.

A alquimia é uma tradição proto-científica historicamente praticada em todo o Velho Mundo da Antiguidade até meados da Revolução Científica dos séculos XVI e XVII. Alquimistas buscavam purificar, amadurecer e aperfeiçoar materiais diversos, mais notoriamente transformar materiais em ouro. A alquimia envolveu ocultismo (sob o alemão Heinrich Cornelius Agrippa, que a misturou com hermeticismo e cabala), a busca de remédios (com Paracelso, que afirmou que o poder da alquimia estava em produzir medicamentos) e não era apenas um exercício de homens excêntricos: figuras históricas como Caterina Sforza (1463-1509), a Tigresa de Forlì, Catarina de Médici (1519-1589), rainha da França, Elizabeth I (1533-1603) e Jaime I (1566-1625), reis da Inglaterra, Rodolfo II (1552-1612), Imperador Romano-Germânico, empregaram ocultistas (notoriamente Nostradamus e John Dee) e, alegadamente, conduziram experimentos em alquimia. Isaac Newton, cuja frase abriu esta seção, frequentemente é chamado de “o último feiticeiro” porque acreditava que seu *magna opus* não era seu trabalho em mecânica celestial ou em ótica geométrica, mas em alquimia. Diversos nomes ainda usados nos dias de hoje, como “espíritos” para álcoois e “vitriolo” para ácido sulfúrico, são herdados de textos em alquimia.

Durante o Iluminismo, com a difusão do racionalismo de René Descartes e do empirismo de Francis Bacon, a forma de se observar o universo mudou. A razão e a experiência passaram a se tornar a fonte do conhecimento humano. Segundo os filósofos britânicos John Locke e David Hume, a mente humana ao nascer é uma *tabula rasa*, sendo preenchida aos poucos via experiência. Não há ideias inatas e todo o conhecimento humano, segundo eles, é derivado somente da experiência. Assim, a era dos experimentos fundamentais da química teve início: foram derivadas as leis ponderais dos gases – Boyle, Charles e Gay-Lussac –, a hipótese de Avogadro (“volumes iguais de todos os gases nas mesmas condições de temperatura e pressão possuem o mesmo número de moléculas”) e o princípio de Lavoisier (“na natureza nada se perde, nada se cria, tudo se transforma”) e a teoria atomística retomou seu papel no estudo da matéria. Ao longo dos séculos XVIII e XIX, avanços nos estudos da chamada “Filosofia Natural” permitiram a Revolução Industrial e o início do mundo contemporâneo. O estudo dos fenômenos eletromagnéticos por Michael Faraday, James Maxwell, Heinrich Hertz, Nikola Tesla etc permitiu que a eletricidade fosse usada para realizar trabalho, aumentar o tempo produtivo e desenvolver a maior parte das tecnologias que moveram o século XX. Foi a partir da sistematização do conhecimento científico que as ciências tomaram a forma que têm hoje.

## 2 O que é conhecimento científico?

No final da Revolução Científica do século XVII, Francis Bacon afirmou que o homem é o interpretador da natureza, que conhecimento e poder humano são sinônimos. Em seu livro *Novum Organum*, Bacon descreve um método investigativo em que, dada a observação sistemática e cuidadosa, usa-se a indução para gerar axiomas que não generalizem nada além dos fatos observados. Realiza-se, então, uma nova etapa de coleta de dados para se criar novos axiomas, formando uma cadeia de conhecimento sempre baseada em fatos observados (i.e., dados empíricos). O método científico de Bacon é empírico-indutivo.

A visão empirista de Bacon e dos filósofos do Iluminismo foi bastante criticada por Karl Popper no século XX. Para Popper, nenhum número positivo de resultados experimentais confirma uma teoria científica, mas apenas um resultado contrário é o suficiente para negá-la. Assim, o conhecimento científico deve ser **falseável**, isto é, que, com base nos conhecimentos pre-existentes, anteriores e independentes da teoria, seja possível imaginar um cenário em que observações experimentais contradizem a teoria. Por exemplo, a lei da gravitação de Newton é falseável porque, se um objeto “caísse para cima” após ser solto em um campo gravitacional que puxasse para baixo, a lei seria falsa. O conhecimento científico ser falseável não implica que ele seja falso. Nas ciências da Natureza, estamos acostumados com a visão popperiana:

- (i) levantamos uma hipótese;
- (ii) derivamos as consequências dessa hipótese (dedução);
- (iii) testamos as consequências da hipótese e determinamos se elas são verdadeiras ou falsas;
- (iv) se alguma das consequências for falsa, rejeitamos a hipótese;
- (v) se todas forem verdadeiras, *provisoriamente* aceitamos a hipótese.

Um dos problemas com a filosofia de Popper é que não se admite o uso de indução para produzir conhecimento científico, o que limita bastante a atuação do cientista. Mesmo que as conclusões obtidas por indução sejam demonstráveis dadas as circunstâncias do experimento, conforme previa Bacon, elas ainda podem ser usadas para entender o problema científico em questão. É assim que geramos modelos e determinamos seus limites.

Há outras formas de se discutir ciência e geração de conhecimento científico. Thomas Kuhn afirmou que se produz ciência por meio da exatidão de paradigmas. Por exemplo, após Isaac Newton desenvolver sua teoria sobre a mecânica dos corpos, esse paradigma foi desenvolvido e explorado até que se encontraram situações anômalas que exigiram troca de paradigmas. Assim que, por exemplo, surgiram a Mecânica Quântica e a Teoria da Relatividade. Imre Lakatos, por sua vez, afirmou que verificabilidade, não falseabilidade, caracteriza avanços científicos, pois duas teorias são comparadas por meio de um experimento, onde podem ser verificadas ou não.

A definição de conhecimento científico ainda é uma questão aberta em filosofia. De forma geral, podemos concluir que, como conhecimento exige algum rigor para ser considerado científico, Popper oferece uma fórmula robusta para a sua geração. Podemos expandir o arcabouço de Popper incluindo o processo indutivo porque a indução envolve um julgamento de plausibilidade dadas as condições em que os dados foram obtidos. Assim, ao construir uma hipótese, devemos saber que tipo de observações invalidam o nosso argumento. Essa sistematização permite que conhecimentos sejam produzidos a partir de observações anteriores e é, em grande parte, o que será feito ao longo deste curso, em que conceitos antigos serão trocados por conceitos novos.

### 3 As fronteiras da química moderna

Não foi sem motivo que Theodor Brown nomeou seu famoso livro-texto de “Química: a ciência central”. Por lidar com as propriedades e as transformações da matéria, a química tem interface com diversos campos do conhecimento: física, ciências dos materiais, geologia, biologia, engenharias, medicina, farmácia etc. Assim, grande parte da ciência de ponta feita em química está na interface entre essas diversas áreas. O diferencial da química nesse contexto, está na capacidade de seus graduados em descrever fenômenos complexos de uma forma bastante simplificada, porém precisa. Considere, por exemplo, a molécula de pentaceno:

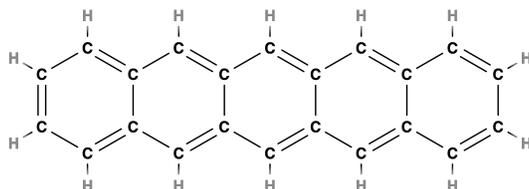


Figura 1: Estrutura de Lewis do pentaceno: cinco anéis aromáticos fundidos em uma direção.

A Figura 1 carrega informações que químicos conseguem entender rapidamente: a molécula de pentaceno é formada por cinco anéis fundidos e é repleto de ligações duplas conjugadas. Uma análise um pouco mais rigorosa nos diz que a molécula é plana e as ligações duplas são deslocalizadas. As ligações C=C conjugadas provavelmente a tornam susceptível a ter absorver radiação ultravioleta. Um químico bem treinado consegue inferir essas e outras propriedades apenas conferindo as estruturas de Lewis mas, a princípio, não há garantia nenhuma que a molécula *realmente* tenha essa disposição espacial e não outra pois estruturas químicas, na maioria das vezes, são inferidas a partir de experimentos. No caso do pentaceno, resultados experimentais confirmam a intuição química. A imagem de microscopia de força atômica (Figura 2) revela uma estrutura condizente com a intuição química. Observe que o microscópio identificou os cinco anéis e, até mesmo, as

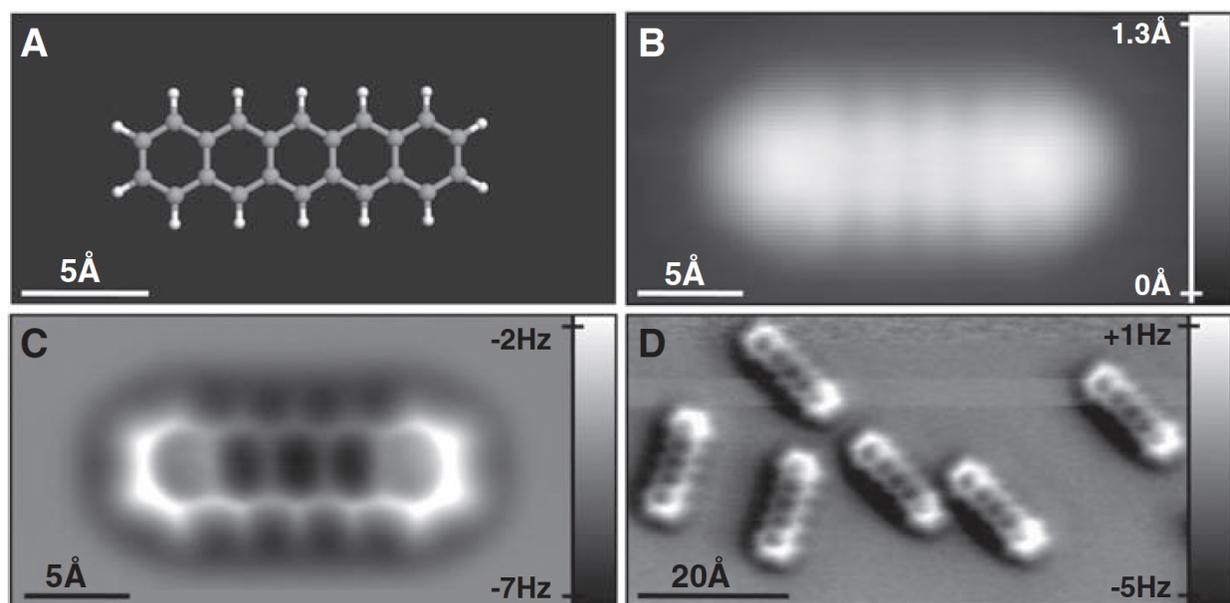


Figura 2: Imagens de microscopia do pentaceno. Em (A), temos o modelo *ball and stick* da molécula. (B) mostra a imagem do pentaceno produzida por microscopia de varredura por tunelamento (STM). (C) é a imagem de alta resolução de uma unidade pentaceno produzida por microscopia de força atômica (AFM), enquanto (D) é a imagem de várias moléculas de pentaceno em uma superfície de cobre. Imagem retirada da referência [1].

ligações covalentes com os átomos de hidrogênio e confirmou as expectativas da análise da estrutura de Lewis. Até mesmo algumas reações químicas puderam ser confirmadas por experimentos semelhantes. A molécula de 1,2-bis((2-etinilfenil)etinil)benzeno, reagente 1 (Figura 3), sintetizada via acoplamento cruzado de Sonogashira, foi depositada em uma superfície de prata e submetida a uma temperatura maior que 90 °C em um equipamento AFM. Veja que as estruturas de Lewis que usamos para representar moléculas são boas representações da estrutura química. Na Figura 3E, é possível até mesmo identificar em que regiões do 1,2-bis((2-etinilfenil)etinil)benzeno estão as ligações triplas. Estruturas de Lewis, no final das contas, são boas formas de condensação de inúmeros fenômenos que ocorrem em escala atômica – as interações entre núcleos, núcleos e elétrons, entre os elétrons, a geometria no plano etc – não podendo ser desprezadas apenas por se tratarem de uma representação relativamente grosseira do mundo microscópico.

O curso de *Introdução à Química Moderna* abrangerá os conceitos microscópicos que fundamen-

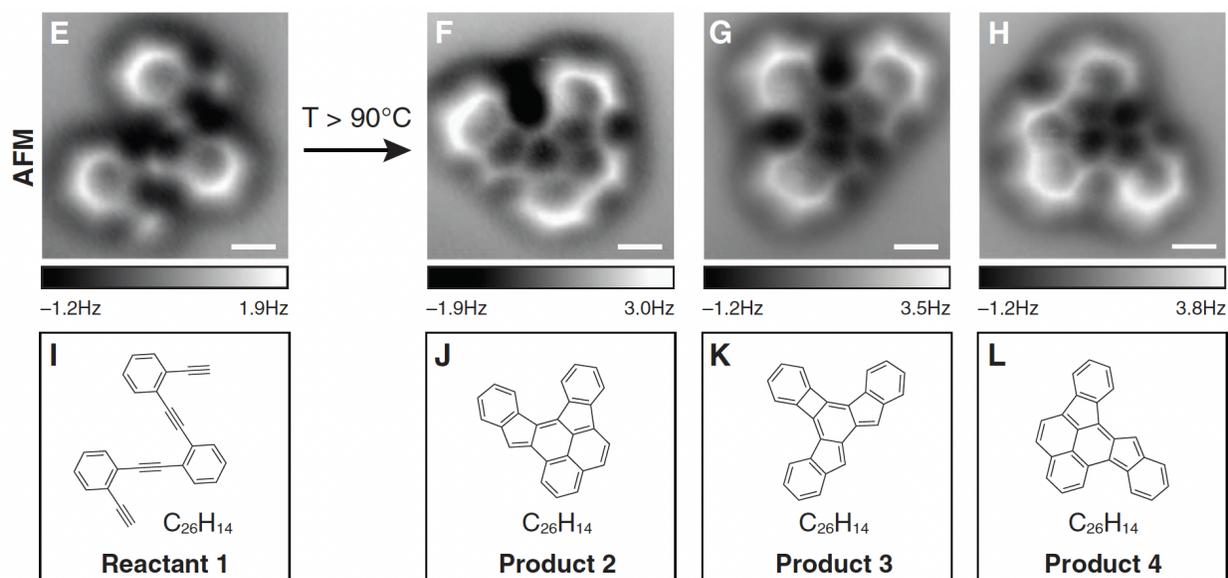


Figura 3: Imagens de AFM (E, F, G, H) do 1,2-bis((2-etinilfenil)etinil)benzeno e dos produtos das reações de ciclização que ocorrem quando  $T > 90^\circ\text{C}$ . Na segunda linha (I, J, K, L), as estruturas de Lewis de cada um dos componentes.

tam a química e que permitem que o universo na escala atômica seja descrito por representações simples como estruturas de Lewis e outros conceitos básicos vistos em cursos introdutórios de química. O objetivo não é apenas justificar o uso da chamada **intuição química** em nossos trabalhos diários, mas também fornecer ferramentas ao aluno que julgue criticamente experimentos e projetos nos quais eventualmente se envolva. Esta disciplina se dedicará, primariamente, a discussão inicial sobre a natureza “estranha” do mundo microscópico e suas implicações em química. Uma abordagem mais ampla e matematicamente complexa do assunto é feita em um curso de **Química Quântica**.

## 4 Referências

- [1] Leo Gross et al. (2009) “The Chemical Structure of a Molecule Resolved by Atomic Force Microscopy.” *Science*, **325**, 1110-1114.
- [2] de Oteyza et al. (2013) “Direct Imaging of Covalent Bond Structure in Single-Molecule Chemical Reactions.” *Science*, **340**, 1434-1437.