

Química e o Método Científico

Química Geral Teórica

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

1 Química e Matéria

De uma forma grosseira, podemos dizer que o universo é composto por matéria e energia radiante. Por matéria atualmente entendemos um tipo de “massa-energia” que se move em velocidades inferiores à velocidade da luz. O uso da expressão “massa-energia” tem uma razão clara: em 1905, o físico Albert Einstein, em seu estudo sobre a Teoria Especial da Relatividade, encontrou uma relação entre a massa inercial de um objeto e sua energia inercial:

$$E = mc^2, \quad (1)$$

onde E representa a energia de um objeto, m representa a sua massa inercial e c é a velocidade da luz no vácuo ($2.9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$). A Equação 1 é importante porque permite a junção de dois princípios básicos que estudaremos bastante ao longo deste curso, o **princípio da conservação da massa** e o **princípio da conservação da energia**. Além disso, ela deixa claro que, independentemente de sua composição, um corpo de massa m tem uma energia associada a si. Por energia radiante, entendemos qualquer tipo de “massa-energia” que se move na velocidade da luz. Veremos mais à frente que o entendimento sobre a natureza da matéria e da radiação tem nuances importantes para o entendimento da estrutura de átomos e moléculas, mas para a maioria dos propósitos do curso, que lida com aspectos mais macroscópicos, podemos considerar a distinção matéria e energia radiante da forma descrita acima.

Diferentes tipos de matéria são chamados de substâncias e a química é a ciência que as estuda – suas estruturas, propriedades e transformações. Como todo o universo é constituído por matéria e a energia radiante influencia o seu comportamento, a química é um campo de estudo que está em contato direto com diversas áreas do conhecimento, sejam ciências puras (física, biologia, geologia) ou aplicadas (engenharia mecânica, engenharia elétrica, farmácia, medicina etc).

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 O Sistema Internacional de Unidades de Medida (SI)

A medição é um aspecto fundamental da ciência contemporânea: sem elas não podemos confirmar ou rejeitar hipóteses de trabalho. Para padronizar medições e permitir comparações entre os diversos trabalhos publicados, foi desenvolvido e aperfeiçoado o Sistema Internacional de unidades de medida a partir do sistema métrico criado durante a Revolução Francesa (1789-1799). A unidade de massa

do SI é o quilograma (kg), definido como a massa de um objeto feito de uma liga de platina e irídio guardada em Paris, na França. Alguns países, como os Estados Unidos, o Canadá e a Inglaterra, costumam expressar massas em libras (lb). As duas quantidades são facilmente conversíveis:

$$1.00 \text{ lb} = 453.59 \text{ g}, \quad (2)$$

em que $1 \text{ kg} = 1000 \text{ g}$. O prefixo k significa uma multiplicação por 10^3 . Outros prefixos comuns estão podem ser vistos na Tabela 1. A unidade do SI para distância é o metro (m). No sistema imperial,

Tabela 1: Prefixos comumente usados para indicar ordens de grandeza de unidades de medição.

Prefixo	Símbolo	Múltiplo
giga-	G	10^9
mega-	M	10^6
kilo-	k	10^3
centi-	c	10^{-2}
mili-	m	10^{-3}
micro-	μ	10^{-6}
nano-	n	10^{-9}
pico-	p	10^{-12}
femto-	f	10^{-15}
atto-	s	10^{-18}

usado por países que foram colonizados pelo Reino Unido, usa-se a polegada (in). A relação entre o metro e a polegada é dada por:

$$1 \text{ m} = 39.37 \text{ in}. \quad (3)$$

Quando falamos em comprar uma televisão de 20 polegadas, consideramos comprar um aparelho cuja diagonal entre dois vértices não consecutivos mede 50.8 cm. 1 in é igual a 2.54 cm. O metro é definido como 1650763.73 comprimentos de onda (discutiremos esse conceito em aulas futuras) da linha espectral vermelho-alaranjado do criptônio 86. As unidades de área e volume são definidas a partir da unidade de comprimento (Tabela 2)

Tabela 2: Unidades de área e de volume.

Tipo	Unidade
Área	$\text{m} \cdot \text{m} = \text{m}^2$
Volume	$\text{m} \cdot \text{m} \cdot \text{m} = \text{m}^3$

A unidade de tempo do SI é o segundo (s), definido como o intervalo ocupado por 9192631770 períodos da linha de microondas do césio 133 de comprimento de onda de 3.26 cm. A unidade de força é o newton (N), isto é, a força necessária para acelerar uma massa de 1 kg em 1 m s^{-2} . Conforme pode ser percebido, **não se recomenda** escrever unidades como razões de números (ex.: m/s^2) mas sim como um produto (ex.: m s^{-2}).

A unidade de energia do SI é o joule (J), que é igual ao trabalho realizado por uma força de 1 N ao longo de uma distância de 1 m. Em química, biologia e em ciências na saúde é comum usar a unidade caloria (cal), relacionada à energia para elevar a temperatura de 1 g de água em 1°C . As unidades caloria e joule (J) são relacionadas por:

$$\text{cal} = 4.184 \text{ J}. \quad (4)$$

É importante não misturar “Cal” com a caloria. Quando a unidade está com letra maiúscula, refere-se à caloria nutricional, que equivale a 10^3 cal (ou 1 kcal).

Quando dois objetos são colocados em contato, a energia térmica flui espontaneamente sempre do corpo mais quente para o mais frio. O quão quente ou frio um objeto está é medido por um termômetro, um medidor de temperatura. A maior parte dos países do mundo usam a escala celsius ($^{\circ}\text{C}$), conhecida pelo seu ponto zero (0°C) na temperatura de congelamento da água e seu ponto 100 (100°C) na temperatura de ebulição da água. Uma escala de temperatura usada em países anglófonos é a escala fahrenheit, em que o ponto de fusão da água é 32°F e a sua ebulição é 212°F . Cada escala tem sua utilidade e razão de ser. A escala celsius é mais simples e mais amplamente usada, enquanto a escala fahrenheit é mais apropriada para temperaturas ao redor das condições ambiente. As escalas celsius e fahrenheit são relacionadas pela expressão:

$$t_{\text{F}} = \frac{9}{5}t_{\text{C}} + 32,$$

onde t_{F} é a temperatura em celsius e t_{C} é a temperatura em fahrenheit. A escala científica, entretanto, é a escala kelvin, que permite que as leis da termodinâmica, campo da física que lida com trocas de energia, sejam escritas da forma mais simples possível. A escala kelvin é dita absoluta, pois o seu zero, chamado de zero absoluto, é a temperatura na qual as partículas fundamentais apenas têm movimento vibracional mínimo. As temperaturas em kelvin estão relacionadas às temperaturas em celsius pela expressão:

$$T = t_{\text{C}} + 273.15,$$

em que T é a temperatura em kelvin, sendo maiúscula por ser considerada uma escala de temperatura absoluta.

3.1 Análise dimensional

Conforme vimos, algumas unidades são compostas, isto é, são fruto do produto ou razão de quantidades físicas diferentes. Por exemplo, 1 N é igual a 1 kg m s^{-2} , pois sabemos que força = massa \cdot aceleração. De forma análoga, 1 J é igual a 1 N m que é igual a $1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$. Ao trabalharmos com problemas físicos e químicos, muitas vezes lidamos com equações contendo parâmetros e variáveis de unidades distintas. Considere a equação a seguir, que descreve o deslocamento ($x(t)$) de um objeto com aceleração constante (a) em função do tempo (t):

$$x(t) = x_0 + v_0 t + a \frac{t^2}{2}, \quad (5)$$

onde x_0 é a posição inicial e v_0 é a velocidade inicial. A primeira observação a ser feita é que, por se tratar de uma igualdade, as unidades do lado direito devem ser iguais às unidades do lado esquerdo. $x(t)$ representa um deslocamento, logo as unidades do lado $x_0 + v_0 t + at^2/2$ devem ser de comprimento (algum múltiplo do metro).

A segunda observação a ser feita é que somente é possível somar quantidades que contém a mesma unidade. Assim, x_0 deve ter a mesma unidade de $v_0 t$ e de $at^2/2$. Considere o termo $v_0 t$. A unidade de velocidade é m s^{-1} e a unidade de tempo é s, logo:

$$\text{unidade}[v_0 \cdot t] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{s} = \text{m} = \text{unidade}[x(t)]. \quad (6)$$

O mesmo raciocínio se aplica ao termo $at^2/2$. A análise das unidades (ou dimensões) é chamada de análise dimensional e é uma ferramenta bastante útil na resolução de problemas químicos.

4 Algarismos significativos e incerteza de medição

Todos os equipamentos em um laboratório têm um grau de incerteza associado. Ao pesar uma substância em um laboratório, por exemplo, você deve estar atento ao nível de precisão da balança empregada. Considere a balança da Figura 1. A massa medida por essa balança será um número de



Figura 1: Visor de uma balança de precisão comum. Observe que a vírgula está localizada após o primeiro zero.

até quatro casas decimais. Essa balança é considerada de precisão porque qualquer massa medida sobre ela será precisa até a terceira casa decimal. A quarta casa decimal é a última a ser mostrada porque a incerteza da balança começa nessa casa. Assim, um objeto de massa 2.314 597 53 g será reportado pela balança como 2.3146 g. Observe que somente quatro casas decimais serão mostradas e que o valor da última casa foi arredondado. A incerteza da balança normalmente é indicada no seu manual.

Chamamos de algarismos significativos os dígitos que carregam significado e necessidade ao reportar um resultado numérico. No exemplo acima, a massa medida tem cinco algarismos significativos. Para identificar algarismos significativos, podemos usar algumas regras:

1. Todos os dígitos diferente de zero e os zeros entre esses dígitos são algarismos significativos. Por exemplo, o número 15003 possui cinco algarismos significativos.
2. Zeros usados somente para posicionar a vírgula não são algarismos significativos. Por exemplo, 0.000 263 L somente possui três algarismos significativos.
3. Se um resultado numérico termina em um ou mais zeros à direita da vírgula, então esses zeros são algarismos significativos. Por exemplo, 2.200 g tem quatro algarismos significativos.
4. Se um resultado numérico termina em zeros que não estão à direita da vírgula, esses zeros podem ou não ser algarismos significativos. Nesses casos, o número de algarismos significativos será deduzido do problema que os apresenta. Por exemplo, em “2000 pessoas foram escolhidas a partir de dados do censo”, o número 2000 contém quatro algarismos significativos. Em “35000 espectadores esperavam a entrada no estádio”, o número 35000 contém apenas dois algarismos significativos.

5. Uma regra útil para determinar se os zeros são significativos ou não é se eles são significantes quando notação científica é usada. Assim, o número 0.0197 é equivalente a 1.97×10^{-2} e tem somente três algarismos significativos, já o número 0.01090 é equivalente a 1.090×10^{-2} e tem quatro algarismos significativos.
6. Números que podem ser contados exatamente, como o número de entrevistados em um censo ou o número de átomos em uma molécula, são considerados exatos e não tem limite na sua precisão. Também o são os fatores de conversão.

Os resultados numéricos finais de um cálculo científico devem ser expressos sempre no número correto de algarismos significativos. Não fazê-lo implica em entregar um resultado impreciso. Na multiplicação e na divisão, o resultado calculado não deve ter mais algarismos significativos do que o fator com o menor número deles. Por exemplo:

$$y = \frac{2.90 + 0.08205 \cdot 298}{0.93}$$

O divisor, 0.93, tem o menor número de algarismos significativos, assim a resposta deve ser dada com apenas dois algarismos. Usando uma calculadora, $y = 76.244742$. Como somente podemos expressar o resultado com 2 algarismos significativos, a resposta correta é $y = 76$. Em uma adição ou uma subtração, os resultados calculados não podem ter mais algarismos significativos do que o número com o menor número de casas decimais:

$$6.939 + 1.00707 = 7.94607 \implies \text{errado}$$

$$6.939 + 1.00707 = 7.946 \implies \text{correto}$$

5 Exercícios e Problemas de Fixação

1. Um experimento científico demonstra que uma teoria aceita tem uma falha fundamental. De acordo com o método científico, como os cientistas envolvidos devem proceder?
2. O volume de uma esfera é dado por $V = (4/3)\pi r^3$, onde r é o raio da esfera. Calcule o volume de uma esfera de raio $r = 100.0$ pm e expresse sua resposta em m^3 .
3. A densidade do ouro é 19.3 g cm^{-3} . Calcule o volume em cm^3 de 31.1 g de ouro.
4. Em quantos minutos a luz leva para viajar do Sol até a Terra dado que o Sol está a 93 milhões de milhas do nosso planeta? Considere $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$