

# A "Estrutura Matemática" da Natureza e da Ciência

A. M. AMORIM DA COSTA\*

## I. MATEMÁTICA E EXPERIÊNCIA

Quando se pretende fazer o elenco dos factos ou das figuras que mais marcaram uma determinada época, muito dificilmente o mesmo facto ou a mesma figura merecerá consenso unânime de quem seja chamado a fazê-lo. Com naturalidade, diferentes pontos de vista e diferentes critérios de valoração levam a diferentes catalogações. Ao terminar o segundo milénio da era cristã em que vivemos, um pouco por toda a parte, apareceram opiniões variadas sobre o acontecimento e sobre a figura que mais o terão marcado. No emaranhado da natural falta de consenso, a Revolução Científica ocorrida ao longo dos séculos XVI e XVII e, no contexto dela, os nomes de L. Da Vinci (1452-1519), N. Copérnico (1473-1543), J. Kepler (1571-1630), Galileu-Galilei (1564-1642) e I. Newton (1642-1727) recolhem o favoritismo da maioria dos analistas.

Reportando-nos à figura de Galileu, gostaríamos de notar aqui a importância que ele atribuía à matemática no estudo das ciências e, sobretudo, a filosofia em que suportava essa importância.

É justamente famosa a questão 6 do seu tratado *O Ensaíador*, escrito em 1623: «a filosofia do Universo, esse grandíssimo livro que continuamente está aberto em frente de nossos olhos, não se pode entender sem primeiro se conhecer a linguagem e os caracteres em que está escrita. A sua linguagem é uma linguagem matemática em que os caracteres são os triângulos, os círculos e demais figuras geométricas, sem o conhecimento dos quais é impossível entender uma só das suas palavras» [1]. De acordo com Galileu, é preciso conhecer bem a ciência matemática para poder conhecer a Natureza; e só é possível interrogá-la devidamente usando a linguagem matemática. É experimentando, com experiências reais e experiências imaginadas que o cientista interroga a Natureza. Consequentemente, a teoria

matemática precede a experiência.

Nesta concepção de Galileu encontramos, pela primeira vez na história do pensamento humano, a ideia da física matemática, ou, em afirmação mais enfática, a ideia do matemático físico [2].

O papel das matemáticas no desenvolvimento da ciência física não era, ao tempo de Galileu, um problema novo. A sua consideração e discussão, no Ocidente, constavam de mais que uma das correntes das Escolas da Antiga Grécia. O próprio Galileu estava consciente disso e tinha por certo tratar-se duma questão que fora assunto fundamental de disputa entre Aristóteles e Platão. Disso mesmo nos dá conta no seu *Diálogo sobre os Dois Principais Sistemas do Mundo*, escrito em 1632, onde, Salviati, o seu porta voz, afirma que "as conclusões matemáticas são exactamente as mesmas no abstracto e no concreto", refusando a posição de Simplicio que defendendo Aristóteles contra Platão, considerava que "as subtilezas matemáticas apenas funcionam muito bem no abstracto, mas não quando se tenta aplicá-las à matéria física sensível" [3]. É mais adiante: «não há outra disputa que tenha dado lugar a tantas especulações muito nobres e muito belas (...) como a questão sobre se o uso das matemáticas na ciência física, enquanto instrumento de prova e termo médio da demonstração é oportuno ou inoportuno; isto é, se ele nos traz alguma verdade, ou, se, pelo contrário, é prejudicial e perigoso. Com efeito, Platão acreditava que as matemáticas eram muito particularmente acomodadas às especulações físicas; e é por isso que ele recorreu muitas vezes a elas para explicar os mistérios físicos. Mas Aristóteles parece ter tido um sentimento inteiramente oposto, e atribuía os erros de Platão a um demasiado amor pelas matemáticas" [4].

Como nota A. Koyré, a diferença entre os sequazes de Aristóteles e os sequazes de Platão neste assunto não é de modo algum, o problema

da certeza, mas sim o da realidade: não é de modo algum o emprego das matemáticas na ciência física, mas sim o do seu papel na e para a própria estrutura da ciência, isto é, da própria realidade [5].

Reportando à estrutura da ciência e, consequentemente, da própria realidade, o matemático físico de Galileu não é, todavia, de modo algum, a defesa da matematização da natureza, que outra coisa se não pode concluir da sua afirmação explícita: "nas demonstrações naturais, não se deve procurar a exactidão matemática" [6], pois que a realidade física – quantitativa e imprecisa – não se molda por si própria à rigidez de noções matemáticas. A matéria natural nunca encarna formas precisas, e as formas nunca a informam perfeitamente; sobra sempre «jogo» e, portanto, a querer matematizar a natureza não se chega a lado nenhum. No mundo real – o mundo físico – não há rectas, nem planos, nem triângulos, nem esferas; os corpos do mundo material não possuem as formas regulares da geometria. As leis geométricas não lhes podem, portanto, ser aplicadas. As leis matemáticas são, para a realidade física, leis aproximadas; os seres físicos «imitam» e se «aproximam» dos seres geométricos [7]. Na sua essência última, o real é matemático, o mesmo é dizer, pode traduzir-se em termos matemáticos; mas a matemática não é o real. A forma geométrica é homogénea à matéria e, portanto, as leis geométricas têm um valor real e dominam a ciência que as tem por objecto, mas não constituem elas própria a realidade. A teoria matemática, como acima ficou escrito, precede a experiência porque é no seu formalismo que esta se objectiva; mas a objectividade da experiência não se consubstancia no formalismo que a suporta.

## 2. A "REALIDADE" DAS ORBITAIS MOLECULARES

As considerações que acabamos de exprimir por referência sumária

ao matematismo físico de Galileu, que temos como um dos mais marcantes acontecimentos do milénio ora lindo, servem-nos de base para nos referirmos aqui à polémica recentemente gerada, no domínio da química-física, em torno do carácter experimental das orbitais moleculares, na sequência da "observação" das orbitais d por J.M. Zuo e colaboradores, da Universidade do Estado de Arizona, nos Estados Unidos, em 1999.

Na capa do seu número de 2 de Setembro de 1999, a revista *Nature* destacava "observadas orbitais", dando realce à comunicação de J. M. Zuo et al. que trazia publicada nas páginas 49-52 [8]. E ainda antes de se chegar às páginas em que a comunicação era apresentada, na secção "news and views", Colin J. Humphreys, do Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia, da Universidade de Cambridge (Inglaterra), reforçava a ênfase contida no título da capa, referindo que "o formato clássico das orbitais electrónicas apresentado nos livros de texto foi agora observado directamente" [9]. Apresentando expressamente a comunicação de J. M. Zuo e colaboradores inserta umas páginas à frente, C. Humphreys refere que estes "usaram uma combinação de difracção de electrões e raios-X para estudar o formato e ligação dos átomos de cobre no óxido de cobre. Este estudo revelou experimentalmente, pela primeira vez, o impressionante formato de algumas das orbitais electrónicas". E sublinha: "a comunicação de Zuo e colaboradores é notável porque a qualidade dos mapas de densidade de carga que apresenta permite, pela primeira vez na história, uma fotografia directa e experimental do formato complexo da orbital  $d_{z^2}$ ."

Na análise pormenorizada dos dados que obtiveram pelo já referido método aplicado ao estudo da ligação Cu-Cu no  $\text{Cu}_2\text{O}$ , Zuo e colaboradores mostram-se de facto maravilhados pela notável correspondência entre os mapas de densidade electrónica que obtiveram experimental-

mente e os diagramas clássicos da orbitais  $d_{z^2}$  que qualquer Manual de Química apresenta: uma forte distorção não-esférica à volta dos átomos de cobre, com o formato característico das orbitais d, e um excesso de carga na região intersticial. O título da comunicação é o indicador mais claro do sentido físico que os autores atribuem à interpretação dos dados obtidos experimentalmente na sua relação com a natureza das orbitais moleculares envolvidas na ligação química em apreço: "direct observation of d-orbital holes...".

O impacto deste trabalho foi grande, tendo sido um dos considerados na elaboração de uma lista dos cinco acontecimentos mais significativos no domínio da Química, em 1999 [10]. A validade da interpretação que os autores deram aos resultados obtidos foi sublinhada com grande ênfase em várias referências. Nomeadamente, em página da Internet, o assunto foi apresentado nos seguintes termos: "de há muito que a ideia das orbitais se revelou de grande utilidade para descrever matematicamente que não fisicamente os átomos e as suas interações. Agora tudo mudou. Investigadores da Universidade do Estado do Arizona publicaram recentemente na *Nature* as primeiras imagens verdadeiras de orbitais atómicas no  $\text{Cu}_2\text{O}$ " [11]. De igual modo, M. Jacoby, no *Chem. Eng. News*, declarava: "lembram-se daquela orbital d referida nos Manuais de Química parecida com um oito tridimensional com um 'donut' em torno da sua parte central? Bem, ela acaba de ser observada experimentalmente por Cientistas da Universidade do Estado do Arizona" [12].

Esta interpretação e apresentação dos resultados experimentais do grupo de J.M. Zuo, sublinhando uma *observação directa* de uma entidade definida e tida como solução teórica de um formalismo matemático, de imediato suscitou a oposição em alguns meios académicos, mantendo viva a questão do realismo científico de muita da terminologia usada por químicos e físicos.

Uma das posições mais claras no

quadro desta polémica foi a de Eric Scerri do Departamento de Química e Bioquímica da Universidade da Califórnia (Los Angeles). Editor Principal das revistas *Foundations of Chemistry* e *Hyle*, duas revistas dedicadas a aspectos filosóficos, históricos, educacionais, culturais e conceptuais no domínio da Química, E. Scerri é autor de variados e extensos trabalhos em que por mais de uma vez, tem afluído o problema do reducionismo e do realismo em Química [13].

Abordando expressamente a problemática suscitada pelo trabalho de J.M. Zuo e colaboradores e pelos comentários que sobre ele foram sendo publicados, em artigo publicado no *Journal of Chem. Education* de Novembro de 2000 [14], Scerri é categórico: "o que Zuo e colaboradores fizeram foi ajustar dados experimentais obtidos por difracção de raios-X e de electrões a um modelo conhecido por refinamento de multipolo. Este método não assume qualquer soma factual de contribuições atómicas, mas ajusta os dados usando uma expansão em termos de funções radiais multiplicadas por harmónicos esféricos em vários centros. O resultado é uma densidade de carga que é então comparada com a densidade de carga que se obtém por sobreposição de contribuições atómicas supondo que o composto seja perfeitamente iónico. O mapa que traduz a variação da densidade de carga em estudo corresponde pois à diferença entre o ajuste experimental e o ajuste esférico ou puramente iónico. Na generalidade, o resultado das experiências deste tipo e a sua subsequente análise é a densidade electrónica total, que pode ser observada directamente, e é-o frequentemente. No caso de cristais moleculares ou de metais, não se assume sequer que o composto seja iónico.

"Não nego que as técnicas usadas por Zuo e col. forneçam uma imagem da densidade electrónica total nos compostos de cobre em questão. O que questiono é que essa imagem constitua uma observação directa das orbitais electrónicas. (...)

## A Estrutura Matemática da Natureza e da Ciência

Não se devem confundir os termos "densidade electrónica" e "orbital". Cada um deles tem o seu significado preciso e o de ambos é e deve ser conservado distinto" [15].

Deixando claro que em sua opinião, o que Zuo e colaboradores haviam observado directamente está longe de ser as orbitais d de que falam os Manuais de Química, neste seu artigo Scerri é peremptório: "não está em causa apenas o facto que as orbitais não podem ser observadas directamente; é que pura e simplesmente, não podem ser observadas. Enquanto nada há no formalismo da Mecânica Quântica que proíba a observação de átomos (ou densidade electrónica), a própria teoria estabelece que as orbitais não são observáveis. A teoria pode estar errada; mas, se esse é o caso, impõe-se encontrar evidência independente que mostre que ela se não aplica à situação em causa" [15].

Esta posição peremptória de Scerri negando toda a possibilidade de observação das orbitais, por não serem estas realidades físicas que possam ser objecto de detecção experimental directa (é neste sentido que neste assunto se deve entender o processo de observação), é posição por ele defendida há longos anos como já referimos. E não está só. No mesmo sentido, reagiram, por exemplo, Spackman et al., da União Internacional de Cristalografia [16] e o grupo de W. H. Schwarz, na Alemanha [17].

É de referir aqui a polémica que nos princípios da década de 1990 se gerou em torno da natureza da ligação química, envolvendo o próprio Linus Pauling, a partir de um artigo de J. F. Ogilvie do Instituto de Ciências Atómica e Moleculares da Academia Sinica (Taiwan), nas páginas do *Journal of Chemical Education*, em que o subtítulo era "there are no such things as orbitals" [18]. Neste seu artigo, Ogilvie deixava claro que as orbitais moleculares eram tão somente objectos de pensamento ("objects of thought") do tratamento quantitativo e matemático da teoria mecâ-

nico-quântica aplicado ao estudo da estrutura molecular e das reais propriedades da matéria; tomá-las como reais e fazer delas ponto chave da ciência química é altamente prejudicial para esta mesma ciência. Defensor de um tratamento do desenvolvimento da ciência Química baseado no estudo experimental das substâncias e suas propriedades, no referido artigo, para Ogilvie a caracterização geral da ligação química não precisaria de ir muito além do saber-se que ela reflecte forças eléctricas com origem em partículas eléctricas cujas coordenadas e momentos podem ser tratados pela lei de comutação. A consideração da sua natureza em termos de orbitais seria de todo irrelevante e irrealista por não serem elas mais que *artefactos matemáticos*. E não é de artefactos matemáticos que podem decorrer propriedades observáveis de um qualquer objecto físico [19]. E, referindo-se concretamente à estrutura tetraédrica de moléculas como o metano, afirma tratar-se de pressupostos falaciosos, pois "nem existe hoje, nem nunca existiu qualquer justificação quantitativa experimental ou teórica" que possa comprovar a hibridização  $sp^3$ .

Quase dois anos depois, na sua réplica a Ogilvie, Linus Pauling [20] não concorda de modo algum que se possa atribuir pouca importância e interesse à caracterização possível da ligação química e, mais genericamente, à estrutura molecular. Afirma uma vez mais o valor que continua a atribuir aos muitos trabalhos realizados por si e toda uma numerosa plêiade de investigadores, na segunda metade do século XIX e ao longo de todo o século XX, e, em particular, a partir da teoria por si próprio desenvolvida, com início na sua publicação "*A Natureza da Ligação Química*", em 1931 [21]. Mais de sessenta anos volvidos sobre os seus primeiros contributos para a caracterização do conceito da ligação química, reitera toda a sua convicção na validade do mesmo e afirma, novamente, ser

esse conceito o mais valioso da ciência química moderna.

Mas, relativamente à afirmação substanciada no subtítulo do artigo de Ogilvie, "there are no such things as orbitals", L. Pauling não conseguiu avançar com outros argumentos que não fossem os decorrentes da simples refutação lógica traduzida na afirmação de que Ogilvie ao admitir que as orbitais mais não eram que "objectos de pensamento" estava a admitir imediatamente que elas eram "alguma coisa", precisamente "objectos de pensamento", pelo que não poderia afirmar, sem se contradizer, tratar-se pura e simplesmente de "coisas" que não existem.

Deixamos ao leitor ajuizar por si próprio a força dos argumentos exibidos de parte a parte, na certeza de que não faltou quem de imediato tercesse armas de argumentação em favor de qualquer das partes em contenda, como o deixa claro uma Nota do Editor do *Journal of Chemical Education* anexa à réplica de L. Pauling ao escrito de Ogilvie. Por nós voltamos aos escritos de Galileu em torno da estrutura matemática da ciência. A natureza está escrita numa linguagem matemática. As rectas, os círculos, os triângulos e outras figuras geométricas são os caracteres dessa linguagem que não poderemos compreender nem expressar em termos científicos se os não conhecermos, nem considerarmos. Mas daí a defender com Platão que também o elemento geométrico é constitutivo de tudo quanto existe, parece-nos ser ousadia que só o domínio estritamente filosófico comporta. Não há ciência sem interpretação dos factos observados. Caracteres da linguagem em que a natureza se exprime, as entidades matemáticas são a base da sua interpretação. Todavia, a sua natureza não permite que as possamos observar directamente; a sua validade traduz-se em juízos cujo verdadeiro valor é permitirem que delas se extraíam princípios gerais das experiências directas e imediatas que relacionem os resultados destas com

# A participação da equipa portuguesa na 6ª Olimpíada Iberoamericana de Química

outros acontecimentos já observados ou que poderão vir a ser observados.

Os químicos computacionais usam as orbitais e as configurações electrónicas como "ficções" matemáticas. A sua utilização para interpretar e melhor compreender quimicamente os fenómenos observados não pode ser feita atribuindo-lhe características duma existência definida, como frequentemente parece subjazer ao tratamento dos fenómenos químicos em que à química quântica é conferido autêntico estatuto de um axioma com base no qual se procura construir a ciência química por processo quase-dedutivo em que toda a ênfase é dada ao modelo teórico decorrente, a estrutura molecular, assente nas orbitais e configurações electrónicas dos elementos. Ao modelo teórico é conferido uma realidade física muito mais concreta do que aquela que de facto possui.

E uma vez mais vêm à liça algumas das múltiplas querelas que o uso do modelo da estrutura molecular na construção da ciência química tem suscitado, ao longo dos anos. Delas ressaltam, muito frequentemente, questões muito sérias sobre a sua conciliação com a própria química quântica. Pelo seu carácter directo e explícito, recordaremos aqui o interessante trabalho de R.G. Woolley, já lá vão mais de duas décadas, questionando logo no título o possível "realismo" da geometria molecular [22]. Nele, o autor mostra que a moderna concepção duma molécula como um todo ligado por uma colecção de electrões e núcleos não é invariavelmente equivalente ao modelo molecular clássico de átomos mantidos juntos por ligações. E daí conclui que a estrutura molecular não é uma propriedade intrínseca das moléculas. Anos depois, este trabalho de R.G. Woolley foi objecto de um outro não menos interessante da autoria de S. J. Weininger que logo no título, rotula a estrutura molecular como um "quebra cabeças" [23]. Nele

analisa a delicada problemática duma química quase-dedutiva em que o formalismo quântico funciona como axioma.

A estrutura matemática da construção da ciência da concepção galilaica, com raízes no platonismo, tornada paradigma da ciência moderna, levou a que uma abordagem dedutivo-presciente se tornasse paradigmática da mais elicaz explicação científica para a maioria dos físicos. Embora a fronteira que delimita os domínios das ciências química e física nem sempre seja marcada por contornos bem definidos e claros, é inegável que a ciência química tem um carácter explicativo e pragmático muito mais acentuado que o da ciência física onde a dedução e predição resultam melhor [24]. Ora, se na prática da própria ciência física há quem muito fundadamente, se oponha a uma abordagem marcadamente dedutiva, não surpreende que a oposição ao mesmo tipo de orientação seja muito maior entre os cultores da ciência química [25]. A indefinição, ou pior ainda, a confusão, entre a realidade lógica e ontológica dos caracteres em que está escrita a linguagem da natureza, só prejudica a posição assumida por uns e outros.

Porque a realidade física se não molda à rigidez de noções matemáticas, a aplicação destas à sua descrição não está isenta de situações paradoxais que claramente indiciam a falacidade da adequação do lógico ao ontológico e justificam os limites de preditabilidade de qualquer modelo teórico.

As orbitais moleculares são elementos dum modelo lógico cuja validade não impede que se ponha em causa o carácter ontológico dos elementos que o constituem, seja no seu todo, seja em algumas das suas partes. Heisenberg, um dos grandes obreiros desse modelo, deixou-o bem expresso, ao referir-se à dificuldade subjacente ao alegado paradoxo da mecânica quântica relativo à existência de nodos nas funções de onda que descrevem as

orbitais electrónicas. Aqui reproduzimos as suas palavras como conclusão adequada às considerações que tecemos a propósito da anunciada observação das orbitais d por M. J. Zuo e colaboradores:

"Essa dificuldade tem a ver com a questão de as mais pequenas unidades da matéria serem ou não objectos físicos, existirem ou não do mesmo modo que existem as pedras e as flores. Neste ponto, o desenvolvimento da teoria quântica mudou por completo a situação. As leis da teoria quântica, formuladas matematicamente, mostram claramente que os nossos habituais conceitos intuitivos não podem ser aplicados. Todas as palavras e conceitos que habitualmente usamos para descrever os objectos físicos, tais como a posição, a velocidade, a cor, etc., tornam-se indefinidos e problemáticos" [26].

\* Dept. de Química – Universidade de Coimbra  
3004-535 Coimbra

## REFERÊNCIAS

- Galileo-Galilei, *Il Saggiatore*, (Roma, 1623) in *Opere*, VI, p.232; e *Lettere a Liceti* de 11.Jan.1641 in *Opere*, XVIII, p. 293. Nota: no presente trabalho, as referências às Obras de Galileu remetem para os 21 volumes da edição de A. Favaro (Florença, 1890-1909) *Opere Complete di Galileo Galilei*.
- A. Koyré, *Estudos Galilaicos*, Publ. D. Quixote, Lisboa, 1986, pp. 345 ss.
- Galileo-Galilei, *Diálogo sopra i due massimi sistemi del mondo* (Florença, 1632), II, in *Opere*, III, p.423.
- Ibidem. *Opere*, III, p.424.
- A. Koyré, *o.cit.*, p.348.
- Galileo-Galilei, *Diálogo sopra i due massimi sistemi del mondo* (Florença, 1632), I in *Opere*, III, p.138.

7. A Koyré. *o.cit.*, pp.349-351.

8. J.M. Zuo, M. Kim, M. O'Keefe e J.C. H. Spence; *Direct observation of d-orbitals holes and Cu-Cu bonding in Cu<sub>2</sub>O* in *Nature*. 401 (1999), pp.49-52.

9. Colin J. Humphreys, *Electrons seen in orbit* in *Nature*, 401 (1999), 21-22.

10. P. Zurer, *Chem. Eng. News*, 77 (48) (1999), p.39.

11. K. Leutwyler, *Observing Orbitals* in <http://www.sciam.com/explorations/1999/092099cuprite>.

12. M. Jacoby, *Chem. Eng. News*, 77 (36) (1999), 8.

13. Ver, por exemplo: E. R. Scerri. *Br. J. Philos.* 42 (1991), 309-325; M.P. Melrose e E.R. Scerri. *J. Chem. Educ.*, 73 (1996), 498-503; E. R. Scerri e L. McIntyre. *Synthese* 111 (1997), 213-232; E. R. Scerri. *Am. Sci.* 85 (1997), 546-553; E.R. Scerri. *Sci. Am.*, 279 (1998), 78-83; E.R. Scerri, *Int. Stud. Philos.Sci.* 12 (1998), 33-44; E.R. Scerri, *Foundations Chem.*, 2 (2000), 1-4; E.R. Scerri, *J. Chem Educ.*, 77 (2000), 522-525.

14. Eric R. Scerri, *Have Orbitals Really Been Observed?* in *J. Chem. Educ.*, 77 (2000), 1492-1494.

15. *Loc. cit.* pp. 1493-1494.

16. M. A. Spackman, J.A.K. Howard and R. Destro, *Int. Union Crystal. Newlett*, 8 (2000), 2.

17. S. G. Wang and W. H. Schwarz, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 39 (2000), 1757-1762.

18. J. F. Ogilvie, *J. Chem. Educ.*, 67 (1990), 280-289.

19. *Loc. cit.* p.287.

20. L. Pauling, *J. Chem. Educ.*, 69 (1992), 519-521.

21. L. Pauling, *J. Am. Chem. Soc.*, 53 (1931), 1367-1400.

22. R.G. Woolley, *Must a Molecule have a shape?* in *J. Am. Chem. Soc.*, 100(1978), 1073-1078.

23. S. J. Weininger, *The Molecular Structure Conundrum: can Classical Chemistry be reduced to Quantum Chemistry?* in *J. Chem. Educ.*, 61(1984), 939-944.

24. D.W. Theobald, *Chem Soc. Rev.* 5 (1976), 203.

25. D. Bohm, *Brit. J. Phil. Sci.*, 12 (1961/62), 103.

26. W. Heisenberg, *Across Frontiers*, Harper & Row, Nova Iorque, 1974, p. 114.



SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE QUÍMICA

**COLABORE  
COM A  
SOCIEDADE**

**NÃO ATRASE O  
PAGAMENTO DAS  
SUAS QUOTAS**

**SPQ – QUOTAS**

<b>Sócio Efectivo</b> .....	<b>6 000\$00</b>
<b>Sócio Estudante</b> .....	<b>3 500\$00</b>
<b>Sócio Casal</b> .....	<b>9 000\$00</b>