

Resenha do Livro “Neither Physics nor Chemistry: a History of Quantum Chemistry”

por Itamar Borges Jr.

Data de publicação na Web: 07 de Maio de 2012

Recebido em 04 de Maio de 2012

Aceito para publicação em 06 de Maio de 2012

O reconhecimento da importância da química quântica na formação do químico no Brasil é crescente e revelado pela criação de cadeiras de graduação e pós-graduação inteiramente dedicadas a ela.

É sintomático que o Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT), criado há mais de 30 anos e praticamente todo dedicado à química quântica, tenha sido coordenado por químicos e físicos em suas edições bianuais. Desde 2001, em sucessão ao papel do *Journal of Theoretical Chemistry – THEOCHEM* iniciado em 1991 até aquela altura, artigos completos baseados nos trabalhos apresentados no SBQT têm sido publicados no *International Journal of Quantum Chemistry* em edições especiais dedicadas ao Simpósio, o que filia o Brasil ao *mainstream* da química quântica internacional (link para todas as edições em <http://www.sbqt.net/pt/proceedings.htm>). No 16º SBQT, realizado em novembro 2011 em Ouro Preto, Minas Gerais, quase 500 participantes em sua grande maioria brasileiros apresentaram seus trabalhos na área.

E o que seria a química quântica? Uma subdisciplina legítima da química? Ou seria apenas uma subárea marginal e aplicada da física? Quais são as origens e os personagens criadores desta disciplina que combina física, química e matemática? Como surgiram os ubíquos modelos de orbitais moleculares e da ressonância da ligação química, apresentados aos estudantes desde o Ensino Médio? Quem são os principais personagens e os embates políticos e pessoais que ajudaram a estabelecer a química quântica como ciência ao longo do século 20?

Cesar Lattes, um dos maiores cientistas brasileiros, reconhecido tanto pelas suas descobertas como pela dedicação à institucionalização da ciência nacional, considerava que a “história é a mais importante das ciências. Sem ela, não há realidade objetiva”.¹ Portanto, fazendo coro ao importante conselho do mestre, é fundamental incluir na formação de cientistas de qualquer área uma sólida base histórica. Uma importante contribuição para a história da química que busca respostas às perguntas do parágrafo anterior foi lançada agora em 2012 pela MIT Press.

Essa contribuição é o fascinante livro *Neither Physics nor Chemistry: a History of Quantum Chemistry* (Nem Física nem Química: uma História da Química Quântica). Os autores, Kostas Gavroglu (Universidade de Atenas, <http://www.gavroglu.gr/>) e Ana Simões (Universidade de Lisboa, http://chcul.fc.ul.pt/membros/ana_si_moes.htm), são reconhecidos pesquisadores da história da química quântica.

O tema do livro é o que os autores definem como a cultura da química quântica: seus conceitos, suas práticas, suas instituições e os personagens mais importantes que a levaram ao seu status atual. O ponto de partida do livro é o momento logo após a consolidação da mecânica quântica na segunda metade dos anos 20 do século passado quando químicos e físicos começam a tentar aplicar a nova teoria da estrutura da matéria a problemas químicos, assombrados pela famosa e muito citada frase de Dirac de 1929, um dos fundadores da mecânica quântica: “As leis físicas subjacentes necessárias para a teoria matemática de grande parte da física e da totalidade da química são portanto completamente

conhecidas, e a dificuldade é somente que a aplicação exata destas leis levam a equações muito complicadas para serem solucionadas.”

Até o uso extensivo dos computadores digitais a partir do início dos anos 1970, período em que o livro termina, os autores definem com pertinência que a “história da química quântica é a história das tentativas de desenvolver estratégias de como superar o quase autonegado empreendimento para usar mecânica quântica para explicar fenômenos químicos”.

Gavroglu e Simões escolheram seis núcleos de questões muito bem articulados entre si para abordar o desenvolvimento da química quântica como disciplina que reúne elementos de química e de física e se tornou uma área do conhecimento em si.

No primeiro núcleo – aspectos epistêmicos – são tratados os múltiplos contextos que estabelecem as fundações para o aparecimento da química quântica, os dilemas dos primeiros praticantes entre um tratamento matemático rigoroso e uma abordagem semiempírica, os novos conceitos introduzidos e os complexos processos de sua legitimação. A fonte destes dilemas estava na equação de Schrödinger, equação básica da mecânica quântica que só tinha solução analítica – isto é, sem necessidade de aproximações matemáticas – para o átomo de hidrogênio. O consenso atual de que a química quântica é um legítimo campo da química nem sempre existiu na história daquela ciência – ao longo século 20 houve tentativas de apropriação da química quântica tanto pela física como pela matemática aplicada. Os autores argumentam que o desenvolvimento histórico da química quântica tem sido a articulação de sua autonomia relativa

tanto da física quanto da química, ou seja, como uma área científica *per se*.

No segundo núcleo – emergência disciplinar - são discutidos alguns aspectos decisivos para a formação do caráter da química quântica. Dentre estes aspectos destacam-se a criação de cátedras, a política universitária, livros-texto, congressos, *networking* e as alianças que os químicos quânticos buscaram com os praticantes de outras disciplinas. Neste núcleo são destaques as ações de divulgação e propaganda de vários cientistas importantes que contribuíram para a gradual emergência da química quântica como subdisciplina com presença social. Dentre estas ações, há os apelos e trabalhos de Walter Heitler (1904-1981), Fritz London (1900-1954) e Friedrich Hund (1896-1996) para aplicar a mecânica quântica a problemas químicos e a movimentação incansável de R. S. Mulliken (1896-1986) para familiarizar e propagandear entre químicos e físicos as vantagens da teoria dos orbitais moleculares. São discutidas também a agressividade de Linus Pauling (1901-1994) para estabelecer a teoria da ressonância como a única descrição da química quântica, as tentativas incessantes de Charles Coulson (1910-1974) para popularizar a sua visão do caráter da valência química, as pesquisas de Raymond Daudel (1920-2006) e Bernard (1919-1996) e Alberte Pullmann (1920-) em moléculas de interesse biológico e a fundação de uma nova revista científica - “*The International Journal of Quantum Chemistry*” - por Per-Olov Löwdin (1916 - 2000).

O terceiro núcleo do livro trata do chamado caráter contingente da química quântica. Gavrolu e Simões situam historicamente a maneira como a química quântica chegou ao estado atual. Qual foi o papel que compromissos metodológicos, filosóficos, ontológicos e considerações institucionais tiveram neste processo, e quais foram os percursos que levaram a formação das práticas e culturas da química quântica.

O quarto núcleo trata do impacto do computador eletrônico no início dos anos 1960 nas práticas dos químicos quânticos. Os autores discutem como a dificuldade fundamental da química quântica - a impossibilidade de realizar cálculos sem aproximações matemáticas - é transformada numa vantagem que também contribuiu para o importante e, relativamente desconhecido, papel da química quântica para legitimar o uso científico dos computadores. A promessa dos cálculos *ab initio*, que não usam dados experimentais em suas equações, fornecer resultados mais confiáveis, se torna mais palpável. Os métodos semiempíricos também se valem do novo paradigma computacional. Nos anos 60 aumenta a complexidade dos problemas moleculares tratados e explode o desenvolvimento de modelos matemáticos e suas respectivas implementações.

Torna-se claro que o progresso da área passa a seguir *pari passu* o avanço dos computadores. Esta situação, que perdura até hoje, tem uma faceta a ser lamentada: parte não desprezível dos pesquisadores da área vive a esperar avidamente por uma nova versão do seu software preferido para usar as novas funcionalidades, o que resulta em uma grande barreira a dificultar o avanço conceitual da química quântica na descrição e previsão dos fenômenos químicos.

No quinto núcleo os autores tratam de questões da química quântica relacionadas com a filosofia da ciência. Reduccionismo, realismo científico, o papel da teoria incluindo seu caráter preditivo e descritivo, o papel de representações pictóricas, a papel de abordagens semiempíricas versus *ab initio* e o status de entidades teóricas e de observações empíricas. Quase a totalidade dos praticantes da química quântica se preocupou em responder a estas questões filosoficamente e consideraram importante abordar tais problemas como um caminho para estabelecer a química quântica.

No sexto e último núcleo são discutidos os “estilos de raciocínio” da química quântica, em especial como são abordados os problemas da área. Exemplos como a extensão de Mulliken do princípio *aufbau* de Bohr a moléculas, o estabelecimento dos orbitais moleculares e a abordagem da teoria de ressonância de Pauling são discutidos.

O livro é baseado em pesquisa meticulosa com grande número de referências primárias que são revelações para os praticantes e interessados na área. Livros de anotações de trabalho e correspondências entre os principais personagens foram estudados e ilustram várias discussões no texto. Uma profusão de notas enriquece cada capítulo. O texto tem uma redação cuidadosa e fluente. Dentro da tradição kuhniana de ressaltar a importância e o papel das comunidades de cientistas na história da ciência, Gavrolu e Simões abordam a sociologia dos primeiros grupos de químicos quânticos na Alemanha, na Grã-Bretanha e na França. O desenvolvimento da química quântica é apresentado como uma ilustração da tendência da ciência do século 20 ser caracterizada pelo cruzamento e exploração de fronteiras disciplinares mediadas por novos instrumentos científicos que, no caso da química quântica, é o computador eletrônico digital.

A história dos primeiros cinquenta anos da química quântica desde a sua criação até os anos 70 tem um relato de grande qualidade. O livro é fortemente recomendado aos interessados na história da química, especialmente aos alunos e professores de química quântica. Trechos do livro podem ser lidos no link

<http://www.ciuhct.com/index.php/pt/outras-publicacoes/358-kostas-simoes-2011.html>.

¹ Documentário “Cientistas Brasileiros: César Lattes & José Leite Lopes” 2003, Brasil. Dirigido por José Mariani.