

IMAGENS DE ORBITAIS EM LIVROS DIDÁTICOS DE QUÍMICA GERAL NO SÉCULO XX: UMA ANÁLISE SEMIÓTICA

Images of orbitals in twentieth-century General Chemistry textbooks: a semiotic analysis

Evandro Fortes Rozentalski [rozentalski@usp.br]

Paulo Alves Porto [palporto@iq.usp.br]

Grupo de Pesquisa em História da Ciência e Ensino de Química (GHQ),
Instituto de Química, Universidade de São Paulo, 05508-900 – São Paulo, SP

Resumo

Este trabalho visa investigar como as imagens relativas ao conceito de orbital foram apresentadas por livros de Química Geral voltados para o Ensino Superior ao longo do século XX, especialmente no que diz respeito a aspectos ontológicos e epistemológicos transmitidos por elas. As imagens presentes em 26 livros utilizados no Brasil foram analisadas de acordo com a semiótica peirceana, a fim de avaliar: qual a natureza do orbital; qual a relação entre representação e objeto representado; quais aspectos do objeto são destacados por meio da representação; quais as restrições e potencialidades da representação. Observa-se que essas imagens são entendidas pelos livros, majoritariamente, como representações da densidade de probabilidade máxima e identificadas, principalmente, por superfícies limites, as quais apresentam os orbitais como possuindo tamanhos, formas e natureza direcional bem definidas. Não há, na maioria dos livros, suficientes esclarecimentos sobre o significado de tais imagens, especialmente em relação: ao objeto do qual a representação toma lugar; como as imagens foram produzidas; quais aspectos a representação destaca do objeto; e quais as semelhanças e diferenças entre as diversas imagens relacionadas aos orbitais. As dificuldades para o ensino, decorrentes dos resultados aqui apresentados, podem ser superadas por meio da discussão explícita sobre o manejo e a compreensão das representações, fomentada, por exemplo, pela semiótica peirceana.

Palavras-Chave: Livros didáticos; Orbital; Imagens; Semiótica peirceana.

Abstract

This paper aims at investigating how the images of orbitals were presented in undergraduate General Chemistry textbooks throughout the twentieth century. Special attention was given to ontological and epistemological aspects related to such images. Images of orbitals from twenty-six textbooks used in Brazilian universities were analyzed according to Peircean semiotics, in order to assess: the nature of the orbital; what is the relation between representation and the represented object; what aspects of the object are highlighted by means of the representation; what are the limits and potentialities of the representation. It is observed that the images of orbitals in the textbooks are generally described as representations of maximum probability density and identified as limit surfaces. Such images present orbitals as possessing well defined sizes, shapes and directional nature. There is not sufficient information in most textbooks on the meaning of such images, especially regarding: the object of which representation takes place; how the images were produced; what aspects of the object the representation highlight; and what are the similarities and differences between the several images related to an orbital. Teaching difficulties arising from the features discussed here may be overcome by means of explicit discussion on the production, use and meaning of the representations, supported by Peircean semiotics.

Keywords: Textbooks; Orbital; Images; Peircean semiotics.

Introdução

Realismo químico e suas implicações para o Ensino de Química

O conceito de orbital é central no Ensino de Química para a compreensão da estrutura da matéria e, principalmente, das teorias quânticas para a ligação química, tais como a Teoria de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria de Orbitais Moleculares (TOM). A partir da introdução de concepções sobre o orbital, professores de química manipulam os diferentes orbitais – apresentados em simulações de computadores, modelos moleculares materiais (concretos) ou no papel como possuindo formas, tamanhos e natureza direcional bem definida – para, por exemplo, prever geometrias moleculares, ou explicar que a sobreposição de orbitais com simetrias e energias adequadas leva à formação da ligação química. Em tais contextos, o emprego corriqueiro sugere a *realidade* não só dos orbitais, mas, também, de suas formas, tamanhos e natureza direcional. Ou seja, orbitais são compreendidos e manipulados *tal como (supostamente) são na Natureza*. Esse entendimento pode ser observado mesmo em níveis avançados da formação de químicos, como mostra o trabalho de Lemes (2013), no qual entrevistas com doutorandos das diferentes subáreas da Química (Inorgânica, Orgânica, Analítica, Físico-Química e Bioquímica) revelaram que a maioria deles não só acredita na realidade da existência de orbitais, como, também, na *forma* que lhes é comumente atribuída nos livros didáticos.

As concepções realistas dos químicos a respeito dos orbitais são reforçadas quando instâncias conceituadas da comunidade científica divulgam que *observações diretas* de orbitais foram obtidas (Figura 1). Em 1999, a revista *Nature* apresentou, na capa de sua edição nº 6748, o título *Orbitais observados*, e imagens do que seriam orbitais d_z^2 , extraídas do artigo de Zuo e colaboradores (1999). Esse trabalho, denominado *Observação direta de buracos de orbitais d e ligação Cu-Cu no Cu_2O* , concluiu que:

A correspondência entre nosso mapa experimental e os clássicos diagramas dos orbitais d_z^2 esboçados nos livros didáticos é marcante. Todos os nossos mapas de diferença mostram uma forte distorção de carga não-esférica ao redor dos átomos de cobre, com as formas características dos orbitais d [particularmente os orbitais d_z^2]. (Zuo *et al.*, 1999, p. 51)

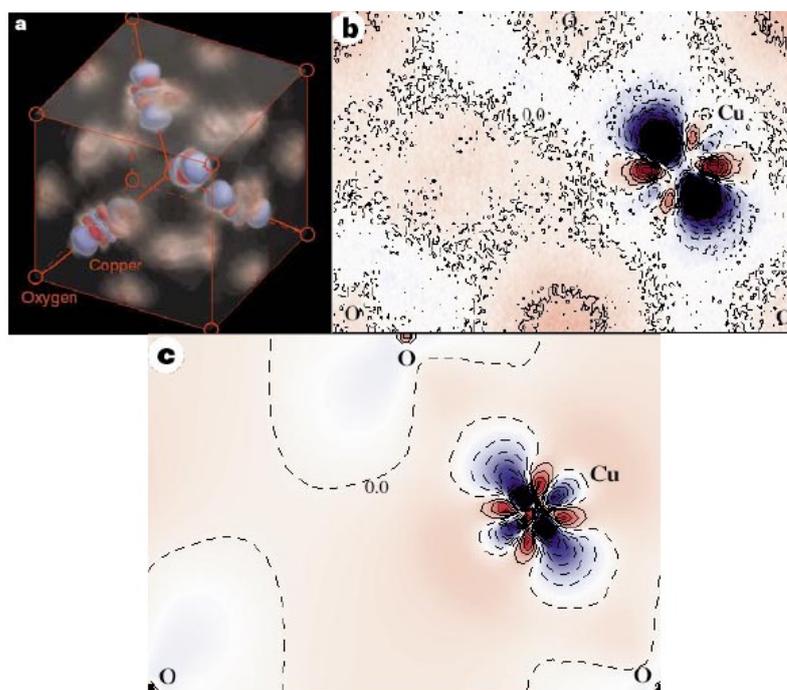


Figura 1 – Imagens publicadas por Zuo e colaboradores (1999, p. 50), e que foram associadas a orbitais d_z^2

Por sua vez, o editorial desse número da revista *Nature*, intitulado *Elétrons vistos em órbita* (Humphreys, 1999, p. 21), vai além do descrito por Zuo e colaboradores (1999) ao afirmar, sem nenhum tipo de ressalva, que orbitais *foram observados diretamente*. Além disso, corrobora a suposta relação de correspondência entre os orbitais d_z^2 e os diagramas de orbitais dos livros didáticos, ao afirmar que “a clássica forma dos orbitais dos elétrons em livros didáticos foi agora observada diretamente” (Humphreys, 1999, p. 21). O editorial acrescenta que:

Pela primeira vez, a forma marcante de alguns dos orbitais do elétron é revelada experimentalmente. [...] O artigo de Zuo *et al.* é notável, porque a qualidade de seus mapas de densidade de carga permite, pela primeira vez, uma ‘imagem’ experimental direta para ser comparada com a forma complexa do orbital d_z^2 . (Humphreys, 1999, p. 21, grifo nosso)

A alegada observação direta dos orbitais teve um grande impacto na comunidade de químicos e físicos: os primeiros consideraram que esse foi um dos eventos mais importantes do ano de 1999 na Química (Zurer, 1999, *apud* Labarca & Lombardi, 2010); enquanto os últimos o indicaram como um dos destaques daquele ano na Física (Yam, 1999, *apud* Labarca & Lombardi, 2010).

Além disso, as afirmações acima foram rapidamente divulgadas, sem maiores ressalvas, em outros meios. Na página eletrônica da revista *Scientific American*, dedicada à divulgação científica, afirmou-se que “a primeira imagem real dos orbitais atômicos do Cu_2O ” havia sido obtida (Leutwyler, 1999). Considerando o objetivo da revista, de divulgar os resultados da ciência para um público mais amplo, conclui-se que não apenas a comunidade científica teve conhecimento de que *orbitais foram observados diretamente*, mas muitos professores e estudantes de ciências também tiveram conhecimento dessa afirmação, direta ou indiretamente.

Outros trabalhos reivindicando a observação de orbitais foram publicados posteriormente na literatura científica especializada, exibindo títulos como: *Vendo orbitais moleculares* (Pascual *et al.*, 2000); *Imagem tomográfica de orbitais moleculares* (Itatani *et al.*, 2004); e *Imagens de orbitais atômicos de cadeias carbônicas atômicas com microscopia eletrônica de alta emissão* (Mikhailovskij *et al.*, 2009). Este último foi divulgado, posteriormente, pela página eletrônica da revista *Scientific American Brasil*, sob o título “Fotografada a verdadeira forma dos átomos” (Castelvecchi, 2010).

Como destaca Scerri (2000), os químicos têm uma tendência a serem realistas ingênuos, sendo esse posicionamento apropriado para alguns casos, e inadequado para outros. Seria adequado, por exemplo, para identificar propriedades secundárias das substâncias, tais como a cor, que é útil na identificação preliminar de muitos compostos químicos. Por outro lado, seria inadequado ao tomar um modelo aproximado como uma descrição fiel da realidade, como é sugerido pela divulgação dos trabalhos sobre as imagens de orbitais (Scerri, 2001).

Assim, o presente trabalho tem como objetivo investigar como as imagens de orbitais foram apresentadas em livros didáticos de Química Geral voltados para o Ensino Superior, ao longo do século XX, buscando caracterizar algumas das concepções ontológicas e epistemológicas transmitidas por essas imagens. Acreditamos ser relevante essa análise, considerando haver, ainda, relativamente poucas pesquisas referentes a livros didáticos do Ensino Superior, em particular da área de Química, como indicam Souza, Mate e Porto (2011); e considerando também a carência de investigações a respeito das imagens que são tão características dessa ciência (Souza, 2012). Os livros didáticos fazem parte da formação de futuros cientistas e professores, tanto do Ensino Médio (EM) quanto do Ensino Superior (ES). Como ressalta Kuhn (2009), os conhecimentos científicos dos profissionais estão baseados, consideravelmente, nos livros didáticos do ES e em outras produções derivadas deles. Assim, este artigo poderá contribuir para avaliar o papel dos livros didáticos na divulgação das compreensões sobre o orbital, observadas entre químicos, professores de química e estudantes de química, e descritas na literatura.

Tendo em vista os casos citados acima, as imagens apresentadas como orbitais sugerem uma relação de igualdade ontológica¹ entre *realidade* e *representação*, ou seja, a não distinção entre o *objeto da realidade* – o orbital – e a *representação do objeto da realidade*. Ainda que os autores das investigações citadas possam estar cientes de que essas imagens são representações da realidade, indiretas e oriundas de modelos matemáticos e experimentais, professores e estudantes de ciências podem entendê-las como registros diretos da realidade, de maneira a não identificar limites e possibilidades inerentes a essas representações. Por consequência, destacamos que nossa atenção estará voltada para questões *representacionais* em torno das imagens dos orbitais, o que, por sua vez, conduz à necessidade de um referencial que propicie uma fundamentação filosófica consistente sobre representações: sua natureza e papel na compreensão da realidade. Para atender a isso, selecionamos a teoria semiótica de Charles Sanders Peirce, a qual tem sido cada vez mais utilizada no âmbito do Ensino de Ciências devido à sua abrangência e fecundidade.

Semiótica peirceana – um referencial de análise das representações em Química

A ciência Química é caracterizada pela produção e transmissão de formas peculiares de representação de seus objetos, fenômenos e processos de estudo, que podem se referir aos mundos macroscópico ou submicroscópico (Gois & Giordan, 2007; Souza & Porto, 2010; Souza & Porto, 2011). Deste modo, as representações permitem ao químico, por exemplo, manipular representações de entidades (átomos, íons, moléculas, etc.) no papel e em *softwares* de simulação, e, por meio destas entidades, fazer previsões de fenômenos no nível macroscópico. Assim, no âmbito do Ensino de Química, as representações são centrais para a construção do conhecimento químico, bem como para a sua divulgação (Souza, 2012).

Diante disso, para compreender as representações empregadas na Química recorreremos à Semiótica, a ciência geral de todas as linguagens, cujo objetivo é “o exame dos modos de constituição de todo e qualquer fenômeno como fenômeno de produção de significação e de sentido” (Santaella, 1994, p. 13). A concepção de representação adotada no presente artigo se fundamenta na teoria semiótica desenvolvida por Charles S. Peirce (1839-1914). Nos últimos anos, abordagens semióticas têm sido cada vez mais usadas como referenciais de análise no Ensino de Ciências (Compiani, 2006; Brando & Caldeira, 2009; Trevisan & Carneiro, 2009) e, particularmente, no Ensino de Química (Gois & Giordan, 2007; Souza & Porto, 2010; Souza & Porto, 2011; Wartha & Rezende, 2011; Souza, 2012; Araujo Neto, 2012). Apesar do crescente número de trabalhos nos últimos anos, Giordan (2008) ressalta que as investigações semióticas sobre a Química ainda carecem de destaque nos programas de pesquisa desta ciência, tanto do ponto de vista filosófico quanto educacional.

Peirce foi um dos pioneiros das teorias semióticas modernas. Químico de formação, mas também matemático, físico e astrônomo, para citar apenas alguns de seus interesses, Peirce concebeu a Semiótica no contexto de um amplo sistema filosófico. Nas discussões subsequentes iremos nos ater, essencialmente, à fenomenologia e à teoria geral dos signos desenvolvidas por Peirce, recorrendo a escritos do próprio autor (Peirce, 1972; 2012), comentadores da semiótica peirceana oriundos da linguística (Santaella, 1994; 2008; 2010; Santaella & Nöth, 2008), e autores da área de Ensino de Ciências, citados no parágrafo anterior, e que utilizam esse referencial.

¹ Uma discussão ontológica diz respeito ao ser, ao que existe ou não existe no mundo, ou à natureza do mundo; uma discussão epistemológica se refere à discussão do conhecimento, à sua possibilidade ou natureza de um dado conhecimento (Pessoa Jr., 2009). Para exemplificar isso, no caso da observação de orbitais, uma discussão ontológica compreenderia a afirmação da existência ou não dos orbitais. Tendo afirmado que tal conceito se refere a uma entidade na Natureza, uma discussão epistemológica abrangeria, por exemplo, a possibilidade ou não de observá-lo.

Fenomenologia e a teoria geral dos signos

Peirce concebeu sua teoria semiótica tendo como histórico anterior o longo período dedicado à pesquisa em Química e Física em fins do século XIX, que lhe proporcionou vasto entendimento dos métodos de investigação da Natureza, de maneira a dominar tanto o que era conhecido por esses campos – teorias e leis – quanto à forma de proceder – metodologias empregadas na investigação da Natureza (Peirce, 1972). Empregando conclusões desses estudos em outros campos de conhecimento – como, por exemplo, Psicologia, Fisiologia e evolução biológica (Souza, 2012) –, Peirce propôs que a análise fenomenológica, isto é, a análise das qualidades universais dos fenômenos, permite a proposição de três categorias abrangendo a apreensão e tradução de tudo o que aparece à nossa consciência²: *Primeiridade*; *Secundidade*; e *Terceiridade* (Peirce, 1972; 2012).

A categoria primeiridade se refere ao “modo de ser daquilo que é tal como é, positivamente e sem referência a qualquer outra coisa” (Peirce, 1972, p. 136). Essa categoria diz respeito à presença imediata de algo, tal como ela se apresenta a nós e sem reflexão (Santaella & Nöth, 2008). Por exemplo, o primeiro contato que temos com a cor vermelha se dá em nível de primeiridade, quando seu efeito em nós é puramente no nível de qualidade, no sentido de percebermos, e, somente isso, a cor vermelha.

A categoria secundidade reside no “modo de ser daquilo que é tal como é, com respeito a um segundo, mas independentemente de qualquer terceiro” (Peirce, 1972, p. 136). Esta é a categoria da relação, em que há um primeiro esforço, no sentido físico-mental, de relacionar o percebido com um segundo (Santaella & Nöth, 2008). No caso do exemplo anterior, em nível de primeiridade, percebemos o vermelho, posteriormente, em nível de secundidade, podemos relacionar esse vermelho com um segundo, por exemplo, um casaco vermelho. Ressalta-se que a ação de um sobre o outro, conferindo o estatuto de secundidade, deve ser de natureza bruta, ou seja, não se empreende uma racionalização de um sobre o outro, que somente ocorre na próxima categoria (Trevisan & Carneiro, 2009).

Por fim, a terceira categoria universal, denominada terceiridade, abarca “o modo de ser daquilo que é tal como é, colocando em relação recíproca um segundo e um terceiro” (Peirce, 1972, p. 136). É nessa categoria que se dá a formação do *signo* (Santaella & Nöth, 2008), proveniente da mediação ou transformação da primeiridade e secundidade (Trevisan & Carneiro, 2009). Assim, tendo em vista os exemplos anteriores, pode-se estabelecer um *hábito* ou *regra geral* de que tal casaco vermelho é usado em dias de frio (terceiridade). Como descreve Peirce (1972), “a função essencial de um signo é tornar eficazes relações ineficazes” (p. 142), que se manteriam neste nível caso se permanecesse unicamente na relação vermelho e casaco vermelho.

Segundo Peirce (1972; 2012), todos os fenômenos da Natureza são redutíveis às três categorias acima, embora não sejam independentes: a secundidade requer a primeiridade, enquanto a terceiridade une primeiridade e secundidade. Assim, um signo, constituído em nível de terceiridade, apresentará, ainda que em diferentes graus, aspectos de primeiridade e secundidade, dado que essas categorias constituem a apreensão e a tradução do fenômeno em signo.

Tendo traçado a compreensão das categorias fenomenológicas de Peirce e, especialmente, a categoria de terceiridade, estamos aptos a explicitar a compreensão desse autor para o significado de um signo:

Um signo, ou *representamen*, é algo que, sob certo aspecto ou de algum modo, representa alguma coisa para alguém. Dirige-se a alguém, isto é, cria na mente dessa pessoa um signo equivalente ou talvez um signo melhor desenvolvido. Ao signo, assim criado, denomino

² Santaella (1994) aponta que, para Peirce, a consciência não se refere, unicamente, à razão. Esta última compõe a consciência, que vai, entretanto, além da razão.

interpretante do primeiro signo. O signo representa alguma coisa, seu *objeto*. Coloca-se no lugar desse objeto, não sob todos os aspectos, mas com referência a um tipo de ideia que tenho [...]. (Peirce, 1972, p. 94.)

Na citação acima, verifica-se que Peirce toma como sinônimos signo e *representamem*. Este último, oriundo do latim, não deve ser traduzido como *representação*, pois em sua obra Peirce (1972) apresenta significados ligeiramente distintos para esses dois conceitos: “Quando se deseja distinguir entre aquilo que representa e o ato ou relação de representar, podemos dar ao primeiro o nome de ‘Representamem’ e ao último o de ‘Representação’” (Peirce, 1972, p. 114, grifo nosso). Diante disso, esclarecemos que em nossa análise das imagens dos orbitais, estaremos interessados em considerações quanto ao *ato de representar*, ou seja, aspectos relacionados à representação.

A tríade: objeto, signo e interpretante

De acordo com a citação anterior, o processo de construção de significados na semiótica peirceana envolve sempre três componentes: *objeto*, *signo* e *interpretante*. O *objeto* representado pelo signo pode ser dividido em *objeto imediato* e *objeto dinâmico*: o primeiro é representado pelo signo, o que resulta, por consequência, em uma representação incompleta e somente de certos aspectos do objeto; o segundo é o objeto em sua totalidade, o qual, por sua própria natureza, o signo não pode exprimir, dado que seria o próprio objeto (Peirce, 1972). No âmbito de investigações da Natureza, o objeto dinâmico pode ser considerado como a realidade em toda a sua complexidade, de maneira que a conhecemos apenas por meio de manifestações de suas qualidades, as quais constituem os objetos imediatos do cientista (Souza, 2012). Peirce (1972) ainda esclarece que o objeto pode ser “perceptível, apenas imaginável ou mesmo insuscetível de ser imaginado em um determinado sentido” (p. 95).

Por sua vez, o *signo* é aquilo que está no lugar de um objeto ou vários objetos, e só pode representar o objeto de certo modo e numa certa capacidade (Santaella, 1994), sendo o veículo para comunicar à mente algo do exterior e transmitir significado (Santaella, 2008). É *pelo* signo e *por meio* dele que conhecemos algo, a ponto de Peirce (1972) sustentar que “todo nosso pensamento e conhecimento se dá por meio de signos” (p. 143).

A incompletude do signo, que representa apenas alguns aspectos do objeto dinâmico, implica que ele sempre está em falta com o objeto (Santaella, 2008). Essa deficiência do signo pode ser encarada como uma virtude, pois a incompletude de qualquer signo gera, como consequência, a mútua *complementaridade* dos signos. Tendo em vista um mesmo objeto ou fenômeno, podemos representá-lo através de diversos signos, cada qual privilegiando certos aspectos em detrimento de outros. Como destacado por Souza (2012), a mútua complementaridade dos signos faz com que as habilidades de manejo e compreensão dos diversos signos empregados sejam cruciais para os que constroem o conhecimento químico e, principalmente, para os que ensinam esse conhecimento. Assim, no âmbito do ensino de Química, devemos discutir os limites e possibilidades de cada representação, e as semelhanças e diferenças entre as representações de um mesmo objeto.

Finalmente, o signo provoca (ou pode provocar) uma ideia no intérprete, seu *interpretante*³ (Santaella, 2008). Este pode ser entendido não somente como um pensamento, “mas uma ação ou uma experiência e podemos chegar a ampliar o significado de modo a seu interpretante ser mera qualidade de sentimento” (Peirce, 1972, p. 142). Tal ideia provocada na mente do intérprete a partir do signo é um novo signo, segundo Peirce (1972), equivalente ou talvez melhor desenvolvido em relação ao que lhe originou. Os interpretantes munem os intérpretes no contínuo processo de interpretação do mundo, pois atuam como *hábitos* ou *regras gerais de ação*. Ao longo desse processo modificam-se (isto é, criam-se novos signos) quando contextos contínuos e plurais de

³ Para Peirce, interpretante não diz respeito ao intérprete do signo, mas ao processo relacional que se gera na mente do intérprete (Santaella, 2008).

interação com os fenômenos são ofertados ao intérprete (Souza, 2012). Por consequência, impõe-se a necessidade do intérprete ter experiências prévias com o objeto para que este possa conhecê-lo e, por sua vez, produzir interpretantes em sua mente, bem como modificá-los.

Tendo delineado os significados de objeto, signo e interpretante para Peirce, faz-se necessário destacar a relação que esses estabelecem com as categorias fenomenológicas *primeiridade, secundidade e terceiridade* expressas anteriormente. Mais adiante, essas também sustentaram a classificação dos signos propostas por Peirce, evidenciando, assim, a centralidade da fenomenologia na semiótica peirceana. Como destacado, essas abrangem a apreensão e tradução dos fenômenos, de modo que podemos entender o objeto em nível de primeiridade, pois se apresenta em sua totalidade e sem relação com um segundo; o signo em nível de secundidade, pois se une a um segundo, seu objeto; e o interpretante em nível de terceiridade, pois se coloca em relação recíproca com um segundo e um terceiro, seu signo e objeto.

Como esclarece Peirce (1972), o interpretante é criado pelo signo, mas também é, de modo mediado e relativo, criado pelo objeto do signo. Desse modo, o signo atua como mediador entre objeto e interpretante. Essa característica estabelece uma relação triádica entre esses três elementos. Ela confere ao processo de significação (semiose) uma natureza ininterrupta, pois o signo representa o objeto apenas em certos aspectos e, dessa maneira, “o signo estará, nessa medida, sempre em falta com o objeto. Daí sua incompletude e conseqüente impotência, sua tendência a se desenvolver num interpretante onde busca se completar” (Santaella, 2008, p. 30), ainda que a completude seja inatingível, o que implica em interpretantes de natureza *provisória*. Essa característica do signo de, a partir de si, gerar novos interpretantes, que são novos signos, e estes interpretantes produzidos serem passíveis de gerarem outros interpretantes, evidenciam que a semiose, uma vez iniciada na mente do intérprete, pode prosseguir indefinidamente.

A classificação dos signos e sua relação com o objeto: ícone, índice e símbolo

Como destaca Queiroz (2007), a classificação dos signos foi aprimorada durante toda a vida de Peirce e, não obstante, permanece até hoje em processo de reelaboração por parte dos semioticistas e pesquisadores de áreas afins. De maneira geral, a classificação signica toma como ponto de partida três tricotomias. As classes elencadas por cada tricotomia levam em conta as variações das categorias de primeiridade, secundidade e terceiridade. Santaella (2008) esclarece que as tricotomias “não funcionam como categorias separadas de coisas excludentes, mas como modos coordenados e mutuamente compatíveis pelos quais algo pode ser identificado semioticamente” (ibid., p. 96), ou seja, a classificação de um signo não estará, *a priori*, restrita a uma única classe ou tricotomia.

A primeira tricotomia se refere ao signo em si mesmo, e se divide em: *quali-signo*, quando o signo é mera qualidade; *sin-signo*, quando o signo é um existente concreto; e *legi-signo*, quando o signo é uma lei geral. A segunda tricotomia diz respeito à relação do signo com o objeto, e se divide em: *ícone*, quando a relação é de qualidade; *índice*, quando a relação é existencial; e *símbolo*, quando a relação é uma associação ou lei geral. A terceira tricotomia diz respeito à relação do signo com o interpretante, e se divide em: *rema*, quando a relação é de possibilidade; *dicente*, quando a relação é de fato; e *argumento*, quando a relação é de razão (Peirce, 1972).

Não nos deteremos nos detalhes da primeira e da terceira tricotomias: restringir-nos-emos à segunda tricotomia, que se mostra mais adequada ao escopo deste trabalho por destacar a relação do signo com o objeto, podendo assim colocar em discussão o estatuto ontológico do objeto representado pelo signo, bem como o alcance epistemológico dessa relação, dessa maneira, contemplando discussões em torno do realismo químico motivadas pelo caso da revista *Nature*. Além disso, Peirce (1972) descreve essa tricotomia como a divisão básica dos signos. Peirce esclarece que, ainda que um signo só se efetive enquanto tal quando produz um interpretante, ele assume a natureza de signo a partir do momento em que se capacita a fazê-lo, isto é, a representar

algo a alguém. Além disso, a referida tricotomia põe em discussão o estatuto ontológico do objeto representado pelo signo, bem como o alcance epistemológico que podemos obter do objeto por meio do signo.

A primeira classe de signo, tendo em vista sua relação com o objeto, é o ícone. A importância atribuída por Peirce a essa classe se revela por sua compreensão de que “o único meio de transmitir diretamente uma ideia é por via de um ícone; e todo método indireto de comunicar uma ideia deve depender, para seu estabelecimento, do uso de um ícone” (Peirce, 1972, p. 117). Peirce dividiu esta classe em: ícones puros e signos icônicos ou hipoícones. Restringiremos as considerações apenas a este último, visto que, diferentemente do ícone puro, os hipoícones “agem propriamente como signos porque representam algo” (Santaella & Nöth, 2008, p. 62).

Hipoícones apresentam uma relação de *similaridade* com o seu objeto (aquele que é representado) e podem ser divididos em imagem, diagrama e metáfora. Dado os propósitos deste trabalho, direcionaremos nossa atenção para as imagens, as quais, quando em si mesmas, visam representar por *similaridades* no nível de qualidades ou, em outros termos, visam representar o objeto por meio de similaridades na aparência (Santaella & Nöth, 2008). As qualidades representadas pelas imagens podem ser, por exemplo, a forma, a cor, a textura, o volume e o movimento relacionado ao objeto. Para além dessa compreensão, os ícones⁴ se caracterizam, também, por sua natureza *operacional*, isto é, por meio de sua observação ou manipulação podem ser obtidas novas informações relacionadas ao objeto, as quais não haviam sido determinantes para a elaboração do signo (Peirce, 1972; Queiroz, 2010).

Como dito anteriormente, esta tricotomia, relação do signo com o objeto, levanta questões de natureza ontológica, particularmente a referencialidade entre signo e objeto. No caso do ícone, que representa o seu objeto por apresentar qualidades em comum com ele, sua capacidade referencial reside em *poder ter* alguma semelhança com as qualidades do seu objeto. Essa característica do ícone, de potencialidade, expressa pelo *poder ter*, revela um grau de ambiguidade desse tipo de signo (Santaella, 2010). Na classe seguinte, constataremos que a referencialidade do índice é direta e sem ambiguidades, pois *indica* o objeto, enquanto que a referencialidade do ícone se apresenta como uma *sugestão*. Portanto, não há uma conexão existencial obrigatória entre signo e objeto, de maneira que um ícone ainda seria significativo mesmo que seu objeto não existisse em um sentido concreto (Peirce, 1972).

A segunda classe de signo, tendo em vista sua relação com o objeto, é o índice. Este possui uma relação de existência ou de correspondência de fato com o seu objeto, de maneira a chamar a atenção do intérprete, visando alertá-lo e conduzi-lo diretamente para o seu objeto (Santaella, 2008). Signos de natureza indicial se caracterizam por se referirem a individuais ou singulares; e são inequívocos quanto ao objeto que eles apontam (Peirce, 1972). Para exemplificar isso, tomemos como exemplo a fotografia, que é uma imagem, isto é, um ícone, tendo em vista que possui similaridades com o objeto, mas que se constitui como um índice, dado que sua conexão com o objeto é de natureza existencial:

Fotografias, especialmente fotografias instantâneas, são muito instrutivas porque sabemos que, sob certos aspectos, são exatamente como os objetos que representam. Esta semelhança é devida ao fato de as fotografias serem produzidas em circunstâncias tais que se viram fisicamente compelidas a corresponder, ponto por ponto, à natureza. Sob esse aspecto, pertencem, pois, à segunda classe de signos, os que o são por conexão física. (Peirce, 1972, p. 118.)

No presente exemplo de índice, a conexão de fato entre signo e objeto ocorre pela interação da luz refletida pelo objeto com a película sensível (o filme fotográfico), conduzindo ao registro,

⁴ Daqui em diante, por questões de simplicidade, utilizaremos simplesmente o termo *ícone* para nos referir aos hipoícones.

sob certos aspectos, do objeto. Tendo em vista isso, o signo possui uma relação física com o objeto; no exemplo citado essa relação é estabelecida pela luz. Caso não houvesse essa conexão física, o signo perderia sua natureza indicial, o que implica na mútua dependência entre signo e objeto como determinante de um índice e, também, que seu objeto é necessariamente um existente concreto.

A terceira categoria de signo, tendo em vista a sua relação com o objeto, é o símbolo. Santaella (2008) o descreve do seguinte modo:

O símbolo é um signo cuja virtude está na generalidade da lei, regra, hábito ou convenção de que ele é portador e a função como signo dependerá precisamente dessa lei ou regra que determinará seu interpretante. (Santaella, 2008, p. 132.)

Assim, enquanto o índice constitui sua natureza por meio de uma conexão física com o objeto, o símbolo constitui sua natureza por meio de uma conexão com o interpretante, que deve estar previamente estabelecido no intérprete, seja como uma lei, regra ou hábito (Peirce, 1972; Santaella, 1994). Os símbolos se caracterizam não apenas por serem de natureza geral, mas assim o são também os objetos aos quais eles se referem. Por exemplo, quando consideramos o conceito de homem, este não produz em nossa mente um homem em particular, mas, todos os homens que possam existir, tal como na denominação biológica de espécie humana. Neste caso, o símbolo homem se refere a um coletivo (Santaella, 2008). Por outro lado, o símbolo será afetado indiretamente pelos individuais que constituem esse coletivo tal como quando identificamos que o filósofo da Grécia Antiga Sócrates (indivíduo) foi um homem (ideia geral). O que configura um símbolo é uma associação ou lei geral com o objeto, que “governa ou é materializada em individuais e determina alguma de suas qualidades” (p. 126). Em suma:

O símbolo é aplicável a tudo aquilo que possa concretizar a ideia relacionada com a palavra. Por si mesmo, entretanto, não identifica as coisas. Não nos mostra um pássaro nem faz celebrar, diante de nossos olhos, uma doação ou casamento, mas supõe que somos capazes de imaginar tais coisas e a elas associou a palavra. (Peirce, 1972, p. 129, grifo no original.)

As palavras de um sistema linguístico são exemplos de símbolos, pois se relacionam com seus objetos simbolicamente através de convenções sociais-culturais-históricas recebidas *a priori* pelos intérpretes, isto é, as palavras só se tornam signos simbólicos quando os intérpretes são levados pelas convenções ou hábitos a interpretar de certo modo seus significados.

É preciso ressaltar que um signo “vem sempre com misturas de caracteres icônicos, indiciais e simbólicos. Nenhum signo atual aparece em estado puro” (Santaella, 2008, p. 27). Santaella e Nöth (2008) elucidam essa afirmação por meio do seguinte exemplo:

A afirmação de que a imagem é sempre e meramente ícone já é relativamente enganadora; a de que a palavra é pura e simplesmente símbolo é decididamente equivocada. Os níveis de convencionalidade, que estão presentes, em maior ou menor medida, nas imagens, correspondem ao seu caráter simbólico, além de que há imagens alegóricas que figuram simbolicamente aquilo que denotam. Assim, também há necessariamente imagem no símbolo, pois sem a imagem o símbolo não pode significar. (Santaella & Nöth, 2008, p. 63.)

Esta consideração deve ser levada em conta para que não tomemos as classes de signos como puras. Isso não impede que o tratamento isolado dos signos, expresso nesta seção, possa ser utilizado, pois é possível inferir que um ou outro caráter, isto é, icônico, indicial ou simbólico, seja predominante em determinado signo por meio da comparação entre os signos investigados.

Metodologia de Pesquisa

Seleção dos livros didáticos de Química Geral

A seleção dos livros a serem analisados se baseou no trabalho de Souza e Porto (2012), que levantaram os livros didáticos de Química Geral utilizados no Ensino Superior durante o século XX no Brasil. Esse levantamento focou em três bases de dados: os catálogos das bibliotecas da Universidade de São Paulo (USP); da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ); e do *site Estante Virtual*⁵, que reúne os acervos de vários sebos brasileiros. As duas Universidades foram escolhidas por serem pioneiras no Ensino Superior de Química no Brasil, e a presença em sebos é um indício da difusão das obras no país. Utilizando como critério a presença simultânea nessas três bases de dados, chegou-se a uma relação de 31 livros didáticos de Química Geral. Desse total, 26 foram investigados no presente trabalho. Os cinco restantes não estavam disponíveis para consulta, por razões diversas, no período de desenvolvimento desta pesquisa, e por isso não foram analisados. Assim, o *corpus* analisado abrange 26 livros de Química Geral para o Ensino Superior utilizados durante o século XX no Brasil, publicados entre 1911 e 2001⁶, os quais encontram-se listados no Anexo 1.

Sistematização e análise de dados

A sistematização e análise dos dados foram pautadas por uma metodologia de cunho essencialmente qualitativo, baseada no referencial teórico da semiótica peirceana. Este referencial nos proporciona modos de entender as imagens relativas ao conceito de orbital, delimitando aspectos considerados importantes para investigação, e fornecendo subsídios para sistematizar e analisar os dados obtidos ao longo da pesquisa (Bogdan & Biklen, 1994).

A finalidade desta pesquisa não é indicar eventuais erros conceituais das imagens de orbitais encontradas nos livros didáticos, mas caracterizar como os autores dos livros as descrevem e empregam, tendo em vista consequências ontológicas e epistemológicas de suas escolhas. Seguindo Bogdan e Biklen (1994), as diferenças entre o referencial teórico e os dados coletados não são vistas como erros: o que se pretende é estudar os conceitos na forma como eles são expressos pelos livros didáticos e, a partir disso, criar um diálogo com os referenciais teóricos. Reflexões decorrentes dessa análise permitem novas compreensões sobre as imagens concernentes ao conceito de orbital e, eventualmente, novas estratégias para seu emprego e discussão no ensino.

Para sistematizar os dados, optou-se, em um primeiro momento, por verificar como o orbital é apresentado em toda a extensão do livro, em detrimento da seleção de apenas um ou mais capítulos particulares – não restringindo essa verificação somente às imagens, mas abarcando todos os aspectos relacionados ao conceito de orbital. Por meio desse primeiro levantamento, observou-se que o conceito de orbital é introduzido e discutido explicitamente, pela primeira vez, em capítulos dedicados à estrutura da matéria. Em capítulos posteriores, especialmente os dedicados à discussão da teoria quântica da ligação química, em que o conceito de orbital é central nas explicações, os autores não retomam considerações aprofundadas sobre o orbital, tal como nos capítulos em que introduziram o conceito.

A partir desse primeiro levantamento, restringiu-se a atenção somente às imagens relativas ao conceito de orbital introduzidas nos capítulos dedicados à discussão da estrutura da matéria. Apesar dessa delimitação, não nos furtaremos em estabelecer comparações, ainda que não tão aprofundadas, com as imagens de orbitais empregadas na discussão da ligação química.

⁵ Página eletrônica: <<http://www.estantevirtual.com.br/>>. Acesso em: 26 de julho de 2011.

⁶ O livro publicado em 2001 foi selecionado pelo fato de a edição americana, da qual foi traduzido, ser datada de 1999, podendo, portanto, ser considerada representativa do final do século XX.

A respeito da seleção das imagens dos orbitais, primeiramente, adotamos o significado de *imagem* apresentado pela semiótica peirceana, em que uma imagem se manifesta por exibir similaridade na aparência com o objeto, sem que este precise ser um existente concreto, podendo ser algo apenas imaginável. Assim, a representação reflete qualidades selecionadas do objeto. Por exemplo, uma qualidade presente nas representações selecionadas se refere à *forma* dos orbitais. Assim, tal critério guiou a *seleção* do que denominamos de *imagens de orbitais*⁷.

Posto isso, a seleção das imagens considerou se suas legendas, ou referências no corpo dos textos, afirmam que se tratam de representações de orbitais. Além disso, foram selecionadas, em especial, as imagens apresentadas e comentadas pela primeira vez em cada livro, visto que os autores se dedicavam a explicar, por exemplo: como são obtidas as imagens; qual o seu significado; a que se referem no corpo da teoria (se são representações da função de onda; ou se são representações da densidade de probabilidade). Esses apontamentos nos permitem delimitar, em um primeiro momento, as compreensões ontológicas e epistemológicas que os autores dos livros didáticos transmitem sobre as imagens relativas aos orbitais: qual a natureza do orbital (estatuto epistemológico); qual é sua referencialidade em relação à realidade, isto é, se as imagens de orbitais se referem ou não a alguma entidade da Natureza (estatuto ontológico); qual a relação entre representação e objeto, no sentido de identificar quais aspectos são destacados do objeto por meio da representação (estatuto epistemológico); quais os limites desta representação, dado que ela reflete o objeto apenas em certos aspectos (estatuto epistemológico); e quais as potencialidades desta representação (estatuto epistemológico).

Conforme mencionado anteriormente, o caráter semiótico das imagens é o de que estas se manifestam, preferencialmente, como ícones. No entanto, além de tal caráter, as imagens podem exibir, também, manifestações indiciais e simbólicas, dado que um signo ocorre como uma mistura de caracteres. O caráter indicial estabelece uma relação factual entre representação e objeto, em que este último necessariamente é um existente. Esse caráter torna-se importante para esta investigação na medida em que, retomando o caso da revista *Nature* descrito no início deste trabalho, constata-se que tanto os autores do trabalho quanto o editorial da revista apelaram às imagens de orbitais para subsidiar a afirmação da observação direta de orbitais. As imagens publicadas na revista *Nature* não foram apresentadas como uma sugestão – uma manifestação icônica – mas como se referindo diretamente ao objeto, ou seja, uma manifestação indicial. Por outro lado, o caráter simbólico associa às imagens aspectos (qualidades) os quais o objeto não possui e que são de natureza convencional. Desse modo, nossa análise avaliará as imagens dos orbitais tendo em vista os conceitos peirceanos de *ícone*, *índice* e *símbolo*.

Por fim, além da análise das imagens dos orbitais por meio da semiótica peirceana, recorreremos, quando necessário, aos debates ontológicos e epistemológicos sobre os orbitais discutidos em Rozentalski (2013), embora estes não constituam o foco principal deste trabalho, visto que esses debates se encontram imbricados com as imagens relacionadas aos orbitais.

⁷ O critério descrito acarreta não incluir em nossas análises outras representações relacionadas aos orbitais, como, por exemplo, seus diagramas de energias e suas equações. Os diagramas são amplamente utilizados pelos livros de Química Geral na segunda metade do século XX, enquanto que as equações foram observadas em poucos livros e, mesmo quando presentes, possuem um caráter meramente ilustrativo, isto é, os livros não fazem operações com as equações nem as utilizam explicitamente para subsidiar explicações que envolvam o conceito de orbital (Rozentalski, 2013). Ainda que tais representações adquiram igual importância para se compreender o conceito de orbital, neste artigo restringiremos nossas considerações às representações do tipo *imagem* devido à repercussão causada pelo artigo da revista *Nature*, onde essas tiveram papel proeminente na alegação da observação direta dos orbitais.

Resultados e discussão

Quando o conceito de orbital foi introduzido nos livros de Química Geral no século XX?

Os livros investigados (Anexo 1) podem ser agrupados em três períodos em relação à apresentação da Mecânica Quântica e, especialmente, do conceito de orbital, tal como expresso na Tabela 1.

Tabela 1 - Presença do conceito de orbital nos livros didáticos de Química Geral

Período	Característica	Número de livros
1911-1932	Ausência de tópicos referentes à Mecânica Quântica	7
1939-1946	Breve introdução ou menção à Mecânica Quântica (não há menção ao conceito de orbital)	3
1950-2001	Discussão pormenorizada da Mecânica Quântica e do conceito de orbital	16

Constatamos que o conceito de orbital passou a ser discutido em detalhes pelos livros de Química Geral a partir da segunda metade do século XX, o que incluiu a introdução de suas imagens. Tomando como referência histórica os trabalhos de Heisenberg, Schrödinger e Mulliken, observa-se que aproximadamente 20 anos se passaram entre a publicação desses trabalhos e sua transposição didática para os livros de Química Geral para o Ensino Superior. Assim, nossas considerações daqui em diante serão direcionadas para o terceiro período (1950-2001) caracterizado na Tabela 1, em que o conceito de orbital se consolida nos livros de Química Geral.

As imagens dos orbitais em livros de Química Geral e sua relação com a teoria

As imagens que representam os orbitais estão presentes em todos os 16 livros investigados, e são prontamente reconhecidas pelos químicos. Ao longo da segunda metade do século XX, tais imagens cresceram em quantidade, por conta do aumento do espaço dedicado à discussão da estrutura da matéria e, principalmente, pela discussão da ligação química.

Na Tabela 2 estão sumarizadas as compreensões transmitidas pelos livros didáticos de Química Geral em relação a o que as imagens rotuladas ou descritas como orbitais correspondem, tendo em vista a Mecânica Ondulatória. Conforme se constata nos livros didáticos, a Mecânica Ondulatória fornece o arcabouço teórico para a construção das representações dos orbitais com características icônicas. Como destaca Souza (2012), a relação entre fundamentação teórica e representações, identificada nos livros didáticos, se mantém na pesquisa em Química, revelando sua importância tanto para a Química quanto para seu ensino.

A predominância das imagens dos orbitais como a densidade de probabilidade máxima evidencia que os livros compreendem de maneira particular esse conceito. Em 1932, Robert Mulliken (1896-1986) enunciou pela primeira vez os conceitos de orbital e de orbital molecular, em artigo no periódico *Physical Review*, para “descrever as funções de onda que são funções de um (e somente um) elétron” (Vemulapalli, 2008, p. 170, grifo nosso). Como esclarecem Wang e Schwarz (2000), tanto a função de onda quanto o conceito de densidade de probabilidade podem ser representados graficamente (ou, em outros termos, representados iconicamente) por superfícies de contorno, ou em duas dimensões por mapas de linha de contorno. No entanto, a predominância da representação da densidade de probabilidade nos livros de Química Geral sugere uma valoração diferente dos dois conceitos, proveniente das consequências ontológicas e epistemológicas de cada

representação e do entendimento do que é um orbital para os autores de livros de Química Geral. Muitos dos livros indicam previamente que a função de onda não possui significado físico (ainda que nenhum deles indique o que entende por isso) – o que implica, aparentemente, em representações do orbital sem significado físico na perspectiva dos livros didáticos (Rozenalski, 2013). Diante disso, os livros recorrem à compreensão que empresta significado físico ao orbital, isto é, a densidade de probabilidade.

Tabela 2 – Caracterização das imagens designadas como orbitais presentes nos livros didáticos de Química Geral

Caracterização da imagem designada como orbital	Livros	Nº de Livros
1. A imagem representa a densidade de probabilidade máxima	Hardwick (1965); Sienko e Plane (1968); Mahan (1970); O'Connor (1977); Slabaugh e Parsons (1977); Quagliano e Vallarino (1979); Masterton e Slowinski (1978); Russell (1981); Brady e Humiston (1986); Pimentel e Spratley (1974); Kotz e Treichel (1998); Atkins e Jones (2001).	12
2. Ambiguidade quanto ao que é representado pela imagem: função onda Ψ ou densidade de probabilidade	Ohlweiler (1967); Brown, LeMay e Bursten (1999).	2
3. A imagem representa a função de onda Ψ	Partington (1950).	1
4. Não há maiores esclarecimentos quanto a que a imagem representa	Pauling (1967).	1

Os aspectos citados anteriormente podem ser discutidos sob o viés da semiótica peirceana, em que a não existência de um objeto na Natureza, tal como os livros se referem à função de onda Ψ , não impossibilitaria a produção de um signo que o representasse. Não obstante, a função de onda abarcaria outros aspectos não contemplados pela representação do conceito de densidade de probabilidade, como, por exemplo, as fases da onda e, também, que diferentes formas para os lobos dos orbitais são produzidas quando se representa a função de onda ou a densidade de probabilidade. Pessoa Jr. (2007) esclarece que as formas dos orbitais, para espécies monoelétrônicas, são dependentes das equações matemáticas utilizadas para produzi-los. Se utilizarmos a função de onda Ψ para representar os orbitais p , obteremos lobos arredondados. Por outro lado, a função de onda elevada ao quadrado, Ψ^2 , gera formas de halteres distorcidos (alongados) para os lobos dos mesmos orbitais p . Diante disso, o emprego destes dois signos permite compreender o objeto estudado em diferentes dimensões, levando o estudante a construir uma compreensão mais elaborada do conceito. Mas, para isso, é preciso destacar os aspectos ressaltados em cada representação, as semelhanças e diferenças entre as representações, e os objetivos almejados pelo uso de cada uma delas (Souza, 2012). Esses esclarecimentos, entretanto, não estão presentes, ou não são suficientemente reforçados pelos livros de Química Geral.

O que se nota é que a análise das imagens pode ser representativa, ainda que indiretamente, das compreensões teóricas dos químicos a respeito do conceito de orbital. Além disso, revela a

relação indissociável entre fundamentação teórica e imagem. Quando temos em vista o caso da revista *Nature*, a ênfase nas imagens recai sobre sua faceta experimental⁸ – um aspecto importante na concepção da imagem, mas não o único, dado que foram produzidas, também, por meio da teoria quântica, por métodos matemáticos e computacionais, as quais guiaram a concepção do experimento, bem como o tratamento e a interpretação dos resultados. Assim, a construção do signo (representação) se processou em dimensões teóricas e experimentais, esta última entendida pela semiótica peirceana por sua natureza indicial.

Entretanto, os livros de Química Geral analisados não revelam, em suas descrições das imagens dos orbitais, os aspectos experimentais envolvidos na produção de tais imagens. As imagens são descritas essencialmente com referência à teoria quântica, como podemos observar na citação abaixo:

Na linguagem da Mecânica Quântica, dizemos que a maior probabilidade é a de se encontrar o elétron num pequeno volume do espaço em torno do núcleo, enquanto é menor a probabilidade de se encontrar o elétron num volume afastado. [...] A imagem visual da Figura 7.16a [Figura 2 (d)] é de uma nuvem cuja densidade é pequena a grandes distâncias do centro; não há fronteira nítida além da qual o elétron nunca se encontra. (Kotz & Treichel, 1998, p. 217-218.)

Em termos da semiótica peirceana, enquanto há, no caso da revista *Nature*, caracteres indiciais que levaram à obtenção da imagem do orbital, nos livros didáticos investigados tais imagens estão ancoradas unicamente na teoria quântica, o que conduz a imagens de natureza majoritariamente icônica. Isso significa que as imagens didáticas podem ter semelhança com o objeto representado, mas não se comprometem com uma relação existencial entre o objeto e sua representação. Assim, uma consideração ontológica, relativa àquela imagem se referir ou não a algo na Natureza, é admitida como de menor importância pelos livros didáticos. Ainda assim, como expresso anteriormente, a distinção feita por muitos livros de que a função de onda não possui significado físico, destaca que a questão ontológica tem algum papel nas considerações e escolhas dos autores. Por outro lado, os autores tendem a dirigir seu interesse para o caráter operacional das representações icônicas, em que a manipulação das imagens dos orbitais conduz a obtenção de novos conhecimentos, não só do próprio objeto – orbital – como nos diz a semiótica peirceana, mas de outros objetos, particularmente a ligação química, como veremos mais adiante.

A natureza das imagens dos orbitais em livros de Química Geral

Observa-se que, de maneira geral, as imagens dos orbitais como densidades de probabilidade máxima são de dois tipos: (1) figuras difusas, provenientes da analogia do comportamento do elétron (como uma nuvem eletrônica) com gradientes de tonalidade de cores, indicando que quanto maior a intensidade do sombreamento, maior a probabilidade de se encontrar o elétron; e (2) figuras com superfícies contínuas e uniformes, as quais limitam uma probabilidade arbitrária de se encontrar o elétron, geralmente indicada pelos livros como sendo de 95%. Essas duas formas de representação coexistem na maioria dos livros analisados, e ambas são caracterizadas como representações da densidade de probabilidade máxima. Contudo, as primeiras são, na maioria dos livros, introduzidas antes das figuras com superfícies contínuas. Além disso, esses diferentes tipos de imagens dos orbitais não se restringem ao primeiro grupo de livros da Tabela 2, pois estão presentes, também, nos demais livros.

⁸ Na introdução deste artigo, delineamos brevemente o caso da *observação direta de orbitais* alegado pela revista *Nature*. Em uma citação apresentada na introdução, verificamos que os autores se referem às imagens dos orbitais como *mapas experimentais*. Tal entendimento das imagens dos orbitais, sem maiores esclarecimentos, sugere uma ênfase nos aspectos experimentais envolvidos na produção daquelas imagens.

Na Figura 2, compilamos algumas das representações de orbitais como figuras difusas, presentes na maioria dos livros⁹:

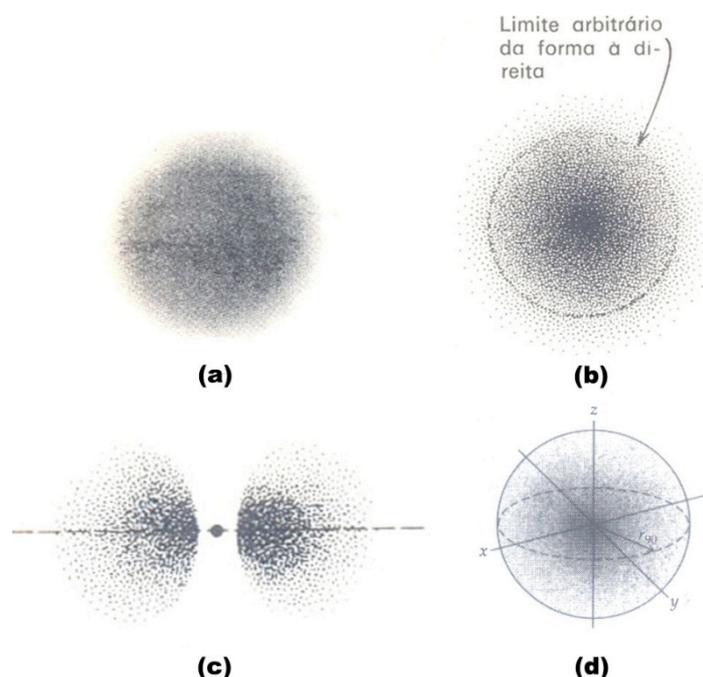


Figura 2 – Representações de orbitais através de figuras difusas: **(a)** orbital s (Hardwick, 1967); **(b)** orbital s (Slabaugh & Parsons, 1977); **(c)** orbital p (Brady & Humiston, 1986); **(d)** orbital s (Kotz & Treichel, 1998)

Outro ponto destacado nos livros, em relação a essas imagens, diz respeito a uma probabilidade finita de se encontrar o elétron, mesmo quando sua distância ao núcleo tende ao infinito. Essa característica acarreta a impossibilidade de se representar no papel um objeto que tende a dimensões infinitas. Assim, os livros de Química Geral destacam que as representações dos orbitais ali expostas compreendem regiões onde a probabilidade de se encontrar o elétron é, segundo a maioria dos livros, de 95%, designadas como regiões de probabilidade máxima. Desse modo, embora as representações dos orbitais como nuvens eletrônicas sejam de natureza difusa, dificultando, conseqüentemente, a delimitação de formas bem definidas para o orbital, as imagens veiculadas pelos livros didáticos tendem a atribuir a ele regiões delimitadas.

Posteriormente, os livros de Química Geral introduzem as representações de orbitais por superfícies limites, isto é, superfícies contínuas e uniformes, objetivando atribuir dimensões e formas bem delimitadas para os orbitais, como mostrado na Figura 3.

Tendo introduzido tais imagens, poucos livros discutem, ainda que brevemente, as restrições e possibilidades da representação dos orbitais por superfícies limites (ou superfícies de contorno):

Há muitas ideias falsas sobre as imagens desse tipo. É preciso entender que *elas não correspondem à realidade*. O núcleo fica envolto por uma “nuvem de elétrons”, e não por uma superfície impenetrável que “contém” os elétrons. O elétron, também, não se distribui uniformemente no volume encerrado pela superfície; ao contrário, é mais provável que se encontre nas vizinhanças do núcleo. (Kotz & Treichel, 1998, p. 218, grifo nosso)

Forma bastante usada de representar os orbitais é a de representar uma superfície que envolve uma parte determinada, por exemplo, 90%, da densidade total de elétrons do

⁹ Embora este artigo apresente somente imagens de orbitais s e p , na maioria dos livros são representados, também, orbitais d e, em um único livro, orbitais f . As representações para os orbitais d e f não foram contempladas na presente investigação, pelo fato de que os orbitais s e p recebem maior atenção nos livros, enquanto os demais orbitais são apenas ilustrados.

orbital. Para os orbitais s essas superfícies de contorno são esferas. Embora se percam, com essa representação, detalhes da densidade de elétrons no interior da superfície, esta não é uma desvantagem séria. No caso de discussões qualitativas, os aspectos mais importantes dos orbitais são os respectivos tamanhos e formas. Estes aspectos ilustram-se bastante bem pelas representações de contorno. (Brown, LeMay & Bursten, 1999, p. 128-129)

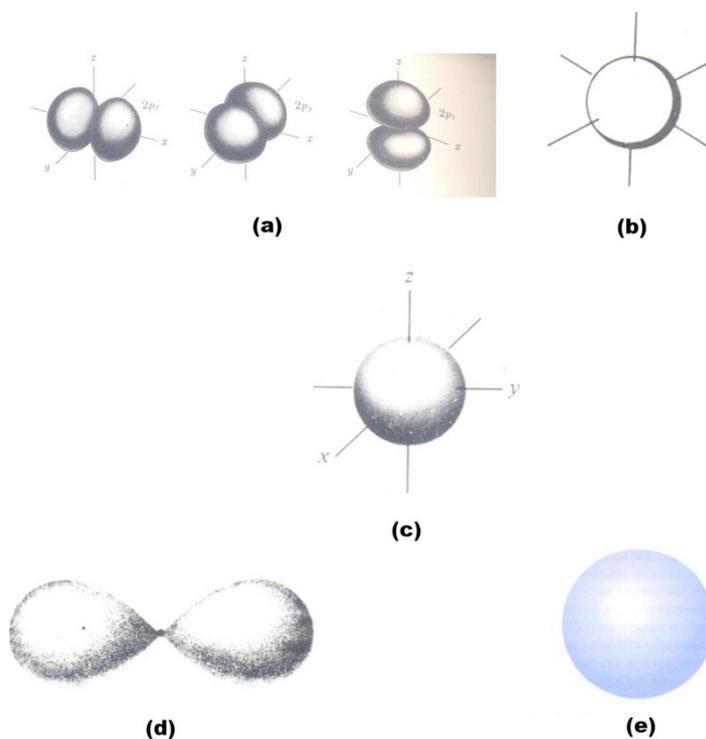


Figura 3 – Representações de orbitais por superfícies limites: **(a)** orbitais p (Mahan, 1970); **(b)** orbital s (O'Connor, 1977); **(c)** orbital s (Russell, 1981); **(d)** orbital p (Brady & Humiston, 1986); **(e)** orbital s (Atkins & Jones, 2001)

A primeira citação esclarece que a superfície contínua não é uma superfície concreta (real), sobre a qual a densidade de elétrons se distribui uniformemente, mas que o modo de representação escolhido é mais fácil de ser desenhado, ainda que seja uma representação menos fiel do orbital. Desse modo, esse livro sugere que a representação do orbital pela nuvem eletrônica é mais fiel à realidade. Por outro lado, a segunda citação destaca os principais aspectos dessas representações: o tamanho e a forma do orbital. Estes aspectos são de suma importância nas discussões posteriores dos livros de Química Geral: o primeiro para discutir propriedades periódicas, tais como raio atômico, energia de ionização, etc.; enquanto que o segundo evidencia a natureza direcional do orbital, subsidiando o entendimento, ainda que aproximado para certas moléculas, das geometrias moleculares, no âmbito das ligações químicas.

A impossibilidade de se representar no papel um objeto que tende a dimensões infinitas leva os livros de Química Geral a recorrerem a delimitações arbitrárias do tamanho da nuvem eletrônica, como mencionado anteriormente. No entanto, representações difusas não são fáceis e nem rápidas de serem reproduzidas em atividades de lápis e papel. Observa-se que poucos são os livros que esclarecem que o emprego das representações dos orbitais por superfícies limites, em detrimento das representações por nuvens eletrônicas, se justifica por ser mais fácil de ser desenhada, evidenciando, portanto, um caráter utilitário dessas representações nas atividades de lápis e papel. Além disso, o recurso a esse modo de representação do orbital enfatiza as principais características (qualidades) que os livros de Química Geral e, de maneira mais ampla, os químicos, veem no orbital: sua forma e natureza direcional.

Do ponto de vista da semiótica peirceana, identifica-se uma ênfase em determinadas qualidades selecionadas do objeto a partir da imagem da nuvem eletrônica em direção à imagem do orbital por superfície limite: forma e natureza direcional do orbital. Mas, não somente qualidades estão em jogo nas imagens, mas também um afastamento do objeto representado, a saber, o elétron. Enquanto as imagens por nuvens eletrônicas transmitem que o objeto representado é o comportamento do elétron, nas imagens por superfície limite, que possui uniformidade e forma bem definida, seus contornos arbitrários ocluem o elétron e sugerem um papel secundário para ele. Esta é uma opção de quem cria tal representação tendo em vista determinados objetivos; no entanto, pode provocar compreensões, ou interpretantes no sentido peirceano, que não são desejados pelos autores dos livros didáticos. Por consequência, é necessário explicitar aos estudantes alguns esclarecimentos quanto à concepção da representação, que vão tocar em questões ontológicas relacionadas ao objeto representado, de modo que o objeto não seja perdido de vista, seja ele um existente ou não.

Assim, nota-se que poucos dos livros de Química Geral tecem comentários ontológicos e epistemológicos sobre as representações dos orbitais por superfícies limites. Mesmo os que o fazem são insatisfatórios na descrição dos significados das imagens exibidas. Além disso, questões como a própria estética das imagens são negligenciadas pelos autores. Por exemplo, na Figura 3, diferentes texturas e intensidades das cores são utilizadas na representação de um orbital, para sugerir sua tridimensionalidade. Antes de se depararem com essas imagens, os estudantes foram introduzidos às imagens dos orbitais por nuvens eletrônicas, nas quais a intensidade do sombreamento apresentava um significado físico, isto é, maior intensidade representava maior probabilidade de se encontrar o elétron em uma dada região. Todavia, nas representações dos orbitais por superfícies limites, as diferentes intensidades de sombreamento não possuem significado físico, sendo um recurso estético para representar no plano um objeto em três dimensões. Apesar disso, nenhum esclarecimento a esse respeito é exposto por qualquer dos autores.

Observa-se também que as representações dos orbitais por superfícies limites predominam nas seções posteriores dos livros didáticos, principalmente em discussões sobre a ligação química, como podemos observar na Figura 4, em que se manipula no papel a sobreposição de orbitais no âmbito da teoria de ligação de valência.

Este tipo de representação é amplamente utilizada nos livros analisados, variando de um livro a outro na estética da imagem (cores utilizadas, textura da superfície, etc.). Embora a maioria das imagens acima seja exibida na discussão da teoria da ligação de valência (TLV), observa-se que a representação dos orbitais no contexto da teoria de orbitais moleculares (TOM) também é feita por meio de superfícies limites.

É no âmbito da ligação química que a natureza operacional da imagem do orbital pode ser identificada nos livros de Química Geral. Nos capítulos sobre a estrutura da matéria, onde esse conceito é introduzido, a imagem do orbital se caracteriza, majoritariamente, por representar seu objeto tendo em vista similaridades na aparência, refletindo, para tanto, qualidades do objeto em questão. Esta é a compreensão mais comum identificada em um ícone – a similaridade na aparência (Queiroz, 2010). No entanto, um ícone se caracteriza, também, por possibilitar a obtenção de novas informações a respeito do objeto ao qual ele se refere. Essa faceta do ícone se nota nos livros didáticos na discussão da ligação química, em que não só obtemos mais informações sobre os orbitais, mas, também, por meio deles obtemos (ou subsidiamos) o entendimento de um novo objeto e, por sua vez, de um novo signo, a ligação química. Tal entendimento se revela pelos interpretantes gerados pelos signos mostrados na Figura 4: a formação da ligação química ocorre pela sobreposição ou interação de orbitais. Além disso, a Figura 4 transmite novas concepções sobre os próprios orbitais, dado que sugere uma interação concreta entre os orbitais, reforçando a concepção de que as formas e a natureza direcional dos orbitais são tais como as apresentadas nas imagens, o que lhes confere maior caráter de realidade. Tendo em vista implicações para o ensino, se de um

lado a potencialidade das imagens dos orbitais atinge seu ápice no âmbito da ligação química, por outro, seu uso corriqueiro e trivial por parte dos químicos pode tornar implícitas possíveis compreensões ontológicas e epistemológicas equivocadas transmitidas pelas imagens aos estudantes que estão se iniciando na Química. Por consequência, visando evitar compreensões inadequadas, tais imagens deveriam ser acompanhadas de considerações sobre seus limites.

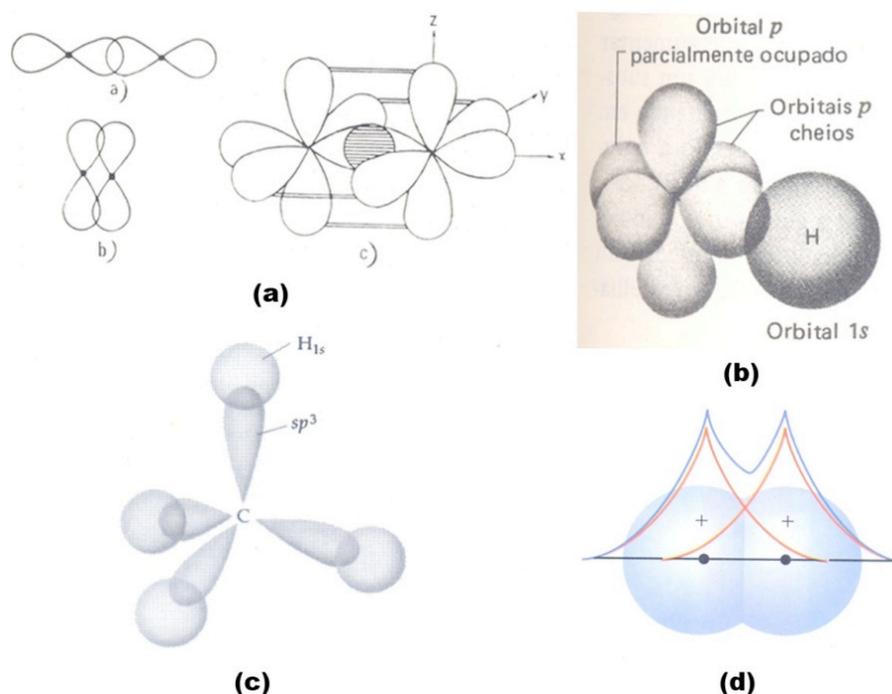


Figura 4 – Representações dos orbitais por superfícies limites na discussão da ligação química: **(a)** sobreposição de orbitais p na molécula de N_2 (Ohlweiler, 1967); **(b)** sobreposição de um orbital $1s$ do H com um orbital $2p$ do flúor (Brady & Humiston, 1986); **(c)** sobreposição de um orbital $1s$ do H com um orbital sp^3 do C (Kotz & Treichel, 1998); **(d)** sobreposição de um orbital $1s$ do H com um orbital $1s$ de outro H, acompanhada da representação das funções de onda isoladas e combinadas (Atkins & Jones, 2001).

Além das imagens de orbitais já descritas, outro tipo de representação, até então não observada nos livros, começa a ter espaço na última década do século XX: a representação por meio do potencial eletrostático.

Atkins e Jones (2001) descrevem do seguinte modo o significado desse tipo de representação:

Uma imagem obtida em um computador gráfico, do íon nitrato, mostra três regiões equivalentes de densidade eletrônica (17) [Figura 5 (b)]. A imagem é um “gráfico do potencial eletrostático”, no qual as regiões de carga líquida negativas são mostradas em vermelho e as regiões de carga líquida positivas são mostradas em azul. As regiões em vermelho representam regiões com uma alta densidade de elétrons; nas regiões em azul, a carga nuclear pode ser observada, pois a densidade eletrônica é relativamente baixa. (Atkins & Jones, 2001, p. 223)

Não há, nos dois livros, qualquer sugestão explícita da relação de tais representações com os orbitais. Entretanto, como vimos que esses livros compreendem o orbital como correspondendo à densidade eletrônica, podemos supor que essas representações se refiram a orbitais. Ainda que essas imagens não sejam orbitais atômicos, mas, orbitais moleculares, estamos considerando o conceito de orbital em um sentido amplo, de maneira a incluí-las em nossas

considerações. Dois aspectos chamam a atenção nessas imagens: maior sofisticação, que se observa pelo aumento de qualidades exibidos pela representação, como, por exemplo, as diferentes cores utilizadas na Figura 5(b) para identificar o potencial eletrostático da molécula; e a indicação de que foram obtidas por meio de um computador, particularmente um *software* de simulação.

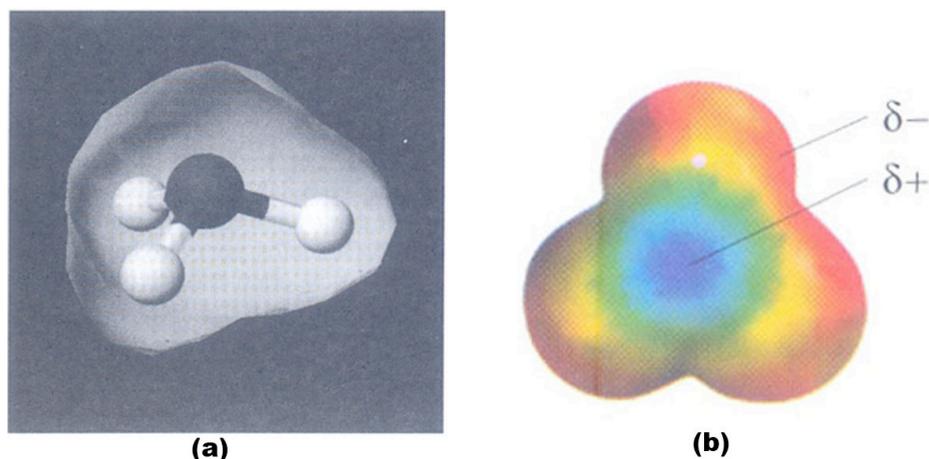


Figura 5 – Representação de orbitais através do potencial eletrostático: **(a)** íon hidrônio, H_3O^+ (Kotz & Treichel, 1998); **(b)** íon nitrato, NO_3^- (Atkins & Jones, 2001).

Em relação ao primeiro aspecto, enquanto que de maneira geral, ao longo do século XX, os livros de Química Geral se caracterizaram por apresentarem imagens simples dos orbitais, isto é, exibindo poucas qualidades, no final do século XX os avanços computacionais começaram a permitir que imagens mais sofisticadas – maior número de qualidades exibidas pela imagem – pudessem ser empregadas pelos autores. Essa maior riqueza de informações na imagem, tal como as diferentes cores exibidas, não necessariamente remete às qualidades do objeto. Desse modo, convencionou-se ao leitor seu significado. Este é o nível simbólico da semiótica peirceana. Obviamente, o aspecto simbólico está presente, também, nas demais imagens apresentadas até aqui, pois a pretensão delas é produzir uma ideia geral nos estudantes relacionadas ao orbital, de modo que por meio dessa ideia os estudantes possam entender casos diferentes, porém relacionados. Entretanto, o caráter simbólico desta última imagem em particular se acentua e, não obstante, torna-se necessário, na medida em que a imagem associa ao objeto, por meio de uma convenção, qualidades – as diferentes cores – que não são do próprio objeto. Caso essa convenção não fosse previamente estabelecida pelos livros didáticos, a imagem poderia provocar no estudante a ideia de que tais cores são identificadas no objeto, quando, obviamente, não possuem significado físico. A esse significado simbólico referente à representação por potencial eletrostático também se manifesta em conjunto uma natureza icônica: as legendas que descrevem o significado das diferentes cores representam, no nível de similaridades, *propriedades* da molécula, quais sejam as diferentes cargas ao longo dela. Assim, embora as cores presentes na imagem não representem aspectos do objeto, a *ideia* relacionada a elas representa iconicamente tais aspectos.

Sobre o segundo aspecto indicado, constata-se que são poucos os livros que indicam como são produzidas as imagens dos orbitais. Somente os livros da última década do século XX comentam a respeito da obtenção das imagens utilizadas na obra. Entretanto, reservam esses sucintos esclarecimentos para as seções iniciais dos livros, especialmente nos prefácios ao leitor, apontando genericamente que as imagens presentes na obra foram desenhadas ou produzidas por meio de *softwares*, sem indicar qual dessas duas técnicas foi utilizada na produção das imagens dos orbitais.

Todos os livros de Química Geral analisados adotam uma abordagem essencialmente qualitativa em relação à Mecânica Ondulatória – a qual se caracteriza por empregar conceitos e técnicas matemáticas sofisticadas para a descrição dos fenômenos quânticos. Essa abordagem privilegia os resultados da Mecânica Ondulatória, sem entrar em detalhes de como são obtidos. Isso se reflete na *não* discussão da matemática subjacente às representações dos orbitais moleculares por mapas de potencial eletrostático e , em especial, que sua origem se dá em combinações lineares de funções de onda Ψ , as quais são de natureza majoritariamente simbólica. O entendimento da matemática subjacente, não só das representações mencionadas anteriormente, mas de todas as representações imagéticas dos orbitais, exigiria o estabelecimento prévio por parte dos estudantes de um conjunto complexo de regras e convenções matemáticas – aspectos tipicamente simbólicos. Diante disso, e tendo em vista que os livros são destinados a estudantes ingressantes no curso de Química, empregam-se as imagens dos orbitais, mais simples em termos do grau de conhecimentos simbólicos necessários para compreendê-las e com o objetivo de representar qualidades relacionadas ao orbital, como, por exemplo, sua forma e natureza direcional.

Embora não esteja explícita nos livros a origem das imagens dos orbitais, de maneira geral, elas se caracterizam por sua natureza majoritariamente icônica. As imagens transmitem ao leitor qualidades dos orbitais, como, por exemplo, suas formas e natureza direcional, e, também, *sugerem* a existência das qualidades representadas. Ainda que predomine o caráter icônico, o poder referencial delas se mantém. Essa sugestão pode ser tomada pelo estudante como um índice, isto é, uma representação cuja referencialidade é direta e *indica* o objeto, não havendo dúvidas, assim, quanto à existência do objeto e informando que o objeto é na Natureza tal como na imagem. Se esse não é o desejo dos autores dos livros didáticos, observa-se aqui um possível obstáculo ao aprendizado do conceito, ainda mais na ausência de esclarecimentos, por partes dos livros, quanto aos significados ontológico e epistemológico das representações dos orbitais.

A diversidade de imagens dos orbitais, identificadas nos livros analisados, revelam uma ideia central em torno das representações ou signos, a saber, a impotência em se representar o objeto em sua totalidade, implicando na mútua complementaridade dos signos. As imagens dos orbitais como nuvens eletrônicas (Figura 2), superfícies limites (Figura 3) ou como potencial eletrostático (Figura 5) evidenciam o emprego de distintas representações que remetem ao mesmo objeto, cada qual visando ressaltar um ou mais aspectos particulares dos orbitais: as nuvens eletrônicas enfatizam o comportamento probabilístico do elétron, salientando as diferentes probabilidades em diferentes posições, conforme a distância em relação ao núcleo; as superfícies limites destacam as formas e o caráter direcional dos orbitais; e o potencial eletrostático salienta a variação da carga eletrônica ao longo da molécula.

O que se vislumbra por meio dessa diversidade de imagens dos orbitais, segundo a perspectiva semiótica, se refere ao fato de que qualquer representação do orbital contempla apenas certos aspectos e, nessa medida, sempre está em falta com seu objeto, resultando necessariamente numa representação incompleta. Essa incompletude nos leva a gerar novas representações que buscam, principalmente, complementar o que as demais não abarcam. Isso pode ser observado nos livros, que apresentam diferentes imagens para o orbital, conforme as qualidades que se deseja destacar e os objetivos pretendidos pela representação. Todavia, no âmbito dos livros de Química Geral, os subsídios para que as habilidades de manejo e compreensão das diversas representações (Souza, 2012) se concretizem são insuficientes, pois os limites e possibilidades de cada representação não são destacados nos livros. Seria relevante, no contexto didático, estabelecer comparações entre as diferentes representações, visando identificar semelhanças e diferenças, bem como os contextos de aplicação de cada uma delas.

Imagens de orbitais vazios: entidades independentes dos elétrons

Por fim, também chama a atenção, em alguns livros de Química Geral, o emprego de imagens de orbitais vazios (Figura 6), ao tratar do tópico ligações químicas. Apesar dessas representações não terem muito espaço nos livros analisados, no decorrer do curso universitário de Química o conceito de *orbitais vazios* ganhará mais espaço e importância na explicação da ligação química. Por exemplo, em disciplinas de química de coordenação e organometálicos, metais e ligantes são descritos como possuindo orbitais vazios disponíveis – isto é, com simetria e energia adequadas – para a formação de ligações.

Nos livros de Química Geral, observamos a representação e a manipulação de orbitais vazios visando discutir a formação da ligação química entre orbitais *cheios* e *vazios*. Nas representações a seguir, é possível notar a interpenetração desses diferentes orbitais:

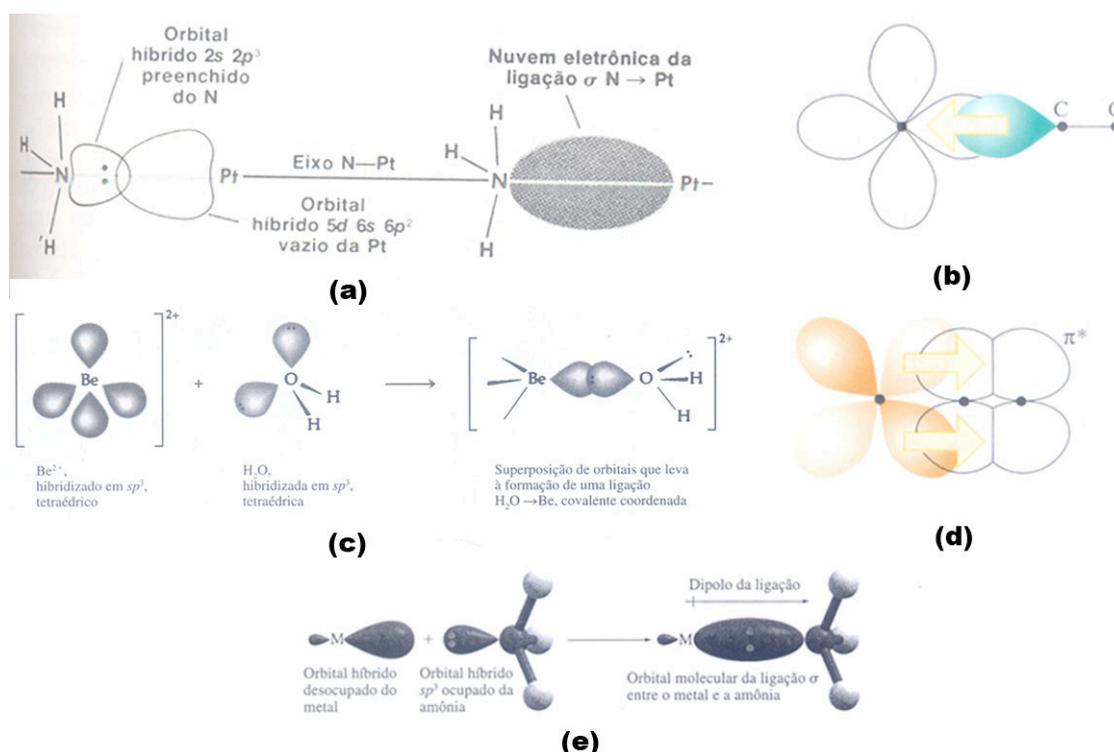


Figura 6 – Representações da sobreposição de orbitais vazios e orbitais preenchidos: (a) sobreposição de um orbital preenchido do N com um orbital vazio da Pt (Quagliano & Vallarino, 1979); (b) sobreposição do orbital preenchido do C do CO com um orbital vazio d de um metal de transição (Atkins & Jones, 2001); (c) sobreposição do orbital do O da água com um orbital vazio do Be (Kotz & Treichel, 1998); (d) retrodoação do orbital d para os orbitais π vazios do CO (Atkins & Jones, 2001); (e) sobreposição de um orbital vazio de um metal com um orbital preenchido do N da amônia (Brown, LeMay & Bursten, 1999).

Apenas as Figuras 6 (b) e 6 (d), oriundas de um mesmo livro, exibem representações consideravelmente diferentes para orbitais *cheios*, que são preenchidos com uma dada cor, e orbitais *vazios*, que não são preenchidos. Ainda assim, da mesma forma que nas demais representações, sugere-se que há uma interação concreta (real) entre um orbital preenchido e um orbital vazio, ou, em outros termos, que há estatutos ontológicos iguais para orbitais cheios e orbitais vazios.

Segundo Ogilvie (1990), o uso corriqueiro e irrefletido de termos como *orbitais vazios* para explicar a doação- π ou a retrodoação em orbitais d na pesquisa em Química e no Ensino de Química sugere que não só os orbitais, mas também os orbitais vazios, existem. No âmbito dos livros, isso ganha ainda mais força por meio das imagens de orbitais vazios, a qual, devido à sua

natureza semiótica, sugere o estatuto ontológico daquilo que é representado, em termos de sua existência e de uma forma definida.

Outra consequência dessa representação é a sugestão, de maneira mais persuasiva, de que o orbital é independente do elétron (Mulder, 2010; 2011). Quando observamos o emprego dos orbitais vazios como, por exemplo, na Figura 6 (d), o texto respectivo descreve que em “um ácido de Lewis, [...] o seu orbital antiligante π vazio pode aceitar densidade eletrônica de um metal” (Atkins & Jones, 2001, p. 721). Neste trecho, não se identifica mais o recurso ao elétron para justificar a origem do orbital vazio representado, corroborando a suposta independência do orbital em relação ao elétron.

Como já mencionado, segundo a semiótica peirceana, os objetos dos quais as representações tomam o lugar não necessitam de existência concreta, e podem ser apenas imagináveis (hipotéticos). Diante disso, o problema que se põe aqui, independente de considerarmos se essas representações se referem ou não a um existente na Natureza, está relacionado às compreensões geradas para o conceito de orbital, ou, nos termos da semiótica peirceana, aos interpretantes que podem ser provocados nos estudantes pelas representações. Como não há, praticamente, discussões quanto ao estatuto ontológico e epistemológico dos orbitais vazios nos livros de Química Geral, as interpretações de seu significado são delegadas aos estudantes. Eventualmente, essas interpretações podem contrastar com a compreensão pretendida, ainda que não explicitada, pelos livros.

Considerações finais

Os livros de Química Geral da segunda metade do século XX, e particularmente as imagens neles contidas, podem ser considerados representativos das compreensões ontológicas e epistemológicas sobre os orbitais que são partilhadas pela comunidade de químicos. Neste artigo, identificamos algumas dessas compreensões, que foram divulgadas para diversas gerações de químicos e professores de Química brasileiros.

As imagens dos orbitais, em sua maioria, são descritas como se referindo a regiões de densidade de probabilidade máxima (ou elevada), exemplificadas pelas representações dos orbitais por superfícies limites. Essas representações destacam a distribuição espacial, especialmente as formas e natureza direcional dos orbitais. A natureza semiótica dessas representações é majoritariamente icônica, sugerindo a realidade do objeto representado por meio de qualidades que remetem a ele.

O que se observa nos livros é uma introdução não problematizada das imagens referentes a orbitais. Não é somente a questão do estatuto ontológico referente ao objeto do qual o signo se põe no lugar que se está deixando de problematizar por parte dos livros, mas também o alcance e os limites das imagens, bem como seus significados. Isso se reflete, muitas vezes, em dificuldades que são delegadas ao estudante, a quem caberá superá-las. Contudo, o mais provável é que essas contradições sejam assimiladas sem problematização pelos estudantes (Lemes, 2013).

O realismo químico irrefletido em relação às imagens dos orbitais pode levar os estudantes a conceberem essas como a *própria* realidade e, ainda, que elas por si só revelam *toda* a informação, sendo, por consequência, autossuficientes. Nossas análises, amparadas na semiótica peirceana, proporcionam subsídios para compreender que as imagens dos orbitais, assim como qualquer representação, são recortes e, necessariamente, visões parciais de um objeto, portanto não se sobrepondo à realidade. Diante disso, a superação da primeira dificuldade no ensino implica em distinguir *representação* (signo) de *representado* (objeto da realidade), o que, necessariamente, conduzirá em explicitar *quais aspectos* do último alimenta a construção do primeiro. Por se tratar de um número finito de aspectos do objeto, devemos ressaltar que sua representação *toma o lugar do*

objeto, mas não em sua totalidade, apenas em certos aspectos. Ao esclarecer isso no ensino, podemos lidar com a segunda dificuldade mencionada: uma única representação não é autossuficiente. Dado que ela nos dá uma visão parcial do objeto, necessitamos construir e apresentar no ensino outras representações que tem em vista um mesmo objeto. O emprego de um conjunto de representações permitirá compreender o objeto em toda a sua multiplicidade, por sua vez, identificando a mútua complementaridade das representações. Desse modo, no âmbito do ensino não haverá *a melhor* representação ou *a representação correta*, todas as representações envolvidas tem igual valor no entendimento do objeto e são mutuamente necessárias.

Os livros de Química Geral deveriam, em nossa perspectiva, apresentar explicitamente aos estudantes suas compreensões ontológicas e epistemológicas a respeito das imagens dos orbitais, explicitando a forma de obtenção de tais imagens e, por sua vez, delimitando suas dimensões teóricas e experimentais. Deveriam também destacar quais os aspectos (qualidades) presentes em cada imagem referentes ao orbital, de modo a não perder de vista o objeto ao qual elas dizem respeito e, também, levando em conta as manifestações icônicas, indiciais e simbólicas presentes na imagem. Ter em mente esses três tipos de manifestações permite entender as imagens em um sentido múltiplo e, principalmente, estar consciente da multiplicidade de ideias que as imagens eventualmente podem provocar nos estudantes. Posto isso, o referencial da semiótica peirceana se mostra fecundo, não somente para análise de imagens e signos de outras naturezas, mas, também, para subsidiar discussões mais amplas sobre as representações empregadas no ensino.

Ainda que as obras investigadas tenham sido publicadas no século passado, os apontamentos deste artigo em torno das imagens dos orbitais se revelam atuais, e podem ser utilizados no contexto do ensino de Química no que diz respeito aos seguintes aspectos: fornecer indícios quanto ao papel dos livros didáticos de Química Geral utilizados na atualidade para a compreensão do conceito de orbital, principalmente no que diz respeito às suas imagens, por parte dos estudantes de química; e proporcionar reflexões de natureza ontológica e epistemológica sobre esse conceito, a fim de subsidiar futuras intervenções no ensino de química que visem conduzir os estudantes a compreensões mais elaboradas.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro destinado a esta pesquisa.

Referências Bibliográficas

Araujo Neto, W. N. (2012). Estudos sobre a noção de representação estrutural na Educação em Química a partir da Semiótica e da Filosofia da Química. *Revista Virtual de Química*, 4(6), 719-738.

Brando, F. R., & Caldeira, A. M. A. (2009). Investigação sobre a identidade profissional em alunos de licenciatura em Ciências Biológicas. *Ciência & Educação*, 15(1), 155-173.

Bogdan, R., & Biklen, S. (1994). *Investigação qualitativa em educação: uma introdução à teoria e aos métodos*. Porto: Porto Editora.

- Castelvecchi, D. (2010). Fotografada a verdadeira forma dos átomos. *Scientific American Brasil* Acesso em 23 abr., 2014, http://www2.uol.com.br/sciam/noticias/fotografada_a_verdadeira_forma_dos_atomos.html.
- Compiani, M. (2006). Linguagem e percepção visual no ensino de Geociências. *Pro-Posições*, 17(1), 85-104.
- Giordan, M. (2008). *Computadores e linguagens nas aulas de ciências: uma perspectiva sociocultural para compreender a construção de significados*. Ijuí: Ed. Unijuí.
- Gois, J., & Giordan, M. (2007). Semiótica na química: a teoria dos signos de Peirce para compreender a representação. *Química Nova na Escola*, Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola (7), 34-42.
- Humphreys, C. J. (1999). Electrons seen in orbit. *Nature*, 401(6748), 21-22.
- Itatani, J., Levesque, J., Zeidler, D., Niikura, H., Pépin, H., Kieffer, J. C., Corkum, P. B., & Villeneuve, D. M. (2004). Tomographic imaging of molecular orbitals. *Nature*, 432(7019), 867-971.
- Kuhn, T. S. (2009). *A estrutura das revoluções científicas*. São Paulo: Perspectiva.
- Labarca, M. G., & Lombardi, O. (2010). Why orbitals do not exist? *Foundations of Chemistry*, 12(2), 149-157.
- Lemes, A. F. G. (2013). *Aspectos filosóficos e educacionais da química: investigando as concepções de doutorandos em química*. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo, São Paulo.
- Leutwyler, K. (1999). Observing orbitals. *Scientific American* Acesso em 21 jul., 2011, <http://www.scientificamerican.com/article.cfm?id=observing--orbitals>.
- Mikhailovskij, I. M., Sadanov, E. V., Mazilova, T. I., Ksenofontov, V. A., & Velicodnaja, O. A. (2009). Imaging the atomic orbitals of carbon atomic chains with field-emission electron microscopy. *Physical Review B* Acesso em 23 abr., 2014, <http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.80.165404>.
- Mulder, P. (2010). On the alleged non-existence of orbitals. *Studies in History and the Philosophy of Modern of Physics*, 41(2), 178-182.
- _____. (2011). Are the orbitals observable? *HYLE – International Journal for Philosophy of chemistry*, 17(1), 24-35.
- Ogilvie, J. F. (1990). The Nature of the chemical Bond – 1990: There are no such things as orbitals! *Journal of Chemical Education*, 67(4), 280-289.
- Pascual, J. I., Gómez-Herrero, J., Rogero, C., Baró, A. M., Sánchez-Portal, D., Artacho, E., Ordejón, P., & Soler, J. M. (2000). Seeing molecular orbitals. *Chemical Physics Letters*, 321(1-2), 78-82.
- Peirce, C.S. (1972). *Semiótica e Filosofia*. São Paulo: Ed. Cultrix.
- Peirce, C. S. (2012). *Semiótica*. São Paulo: Perspectiva.

- Pessoa Jr., O. (2007). A representação pictórica de entidades quânticas da química. *Química Nova na Escola*, Cadernos temáticos de Química Nova na Escola (7), 25-33, 2007.
- Pessoa Jr., O. (2009). A classificação das diferentes posições em Filosofia da Ciência. *COGNITIO-ESTUDOS: Revista eletrônica de filosofia*, 6(1), 54-60.
- Queiroz, J. (2007). Classificações de signos C.S.Peirce: de 'On the logic of science' ao 'Syllabus of certain topics of logic'. *Trans/Form/Ação*, 30(2), 179-195.
- Queiroz, J. (2010). Tradução criativa, diagrama e cálculo icônico. *ALEA: Estudos Neolatinos*, 12(2), 322-332.
- Rozentalski, E. F. (2013). *O estatuto ontológico e epistemológico do orbital em livros didáticos de química geral no século XX: uma análise de seus fundamentos, suas representações e implicações para a aprendizagem*. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo, São Paulo.
- Santaella, L. (1994). *O que é Semiótica*. São Paulo: Brasiliense.
- Santaella, L. (2008). *A teoria geral dos signos: como as linguagens significam as coisas*. São Paulo: Cengage Learning.
- Santaella, L. (2010). *Semiótica aplicada*. São Paulo: Cengage Learning.
- Santaella, L. & Nöth; W. (2008). *Imagem: cognição, semiótica, mídia*. São Paulo: Iluminuras.
- Scerri, E. (2000). Philosophy of chemistry: A new interdisciplinary field? *Journal of Chemical Education*, 77(4), 522-525.
- Scerri, E. (2001). The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues. *Philosophy of Science*, 68(3), S76-S88. Supplement: Proceedings of the 2000 Biennial Meetings of the Philosophy of Science Association. Part I: Contributed papers.
- Souza, K. A. F. D. (2012). *Estratégias de comunicação em química como índices epistemológicos: análise Semiótica das ilustrações presentes em livros didáticos ao longo do século XX*. Tese de Doutorado, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo.
- Souza, K. A. F. D., & Porto, P. A. (2010). *Elementos da Semiótica peirceana na educação em química: considerações e possibilidades*. In: XV Encontro Nacional de Ensino de Química – DF, Brasília: 2010. Anais... Brasília: UNB. Acesso em 18 mar., 2013, <http://www.xvneq2010.unb.br/resumos/R1052-1.pdf>.
- Souza, K. A. F. D., & Porto, P. A. (2011). *Estratégias visuais na construção de uma realidade química: análise Semiótica das ilustrações em livros didáticos ao longo do século XX*. In: VIII Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências – SP, Campinas: 2011. Anais... Campinas: UNICAMP. Acesso em 15 out., 2012, <http://adaltech.com.br/testes/abrapec/resumos/R0929-1.pdf>.
- Souza, K. A. F. D., & Porto, P. A. (2012). A. Chemistry and chemical education through text and image: Analysis of twentieth century textbooks used in Brazilian context. *Science & Education*, 21(5), 705-727.
- Souza, K. A. F. D.; Mate, C. H. & Porto, P. A. (2011). História do uso do livro didático Universitário: o caso do Instituto de Química da Universidade de São Paulo. *Ciência & Educação*, 17(4), 873-886.
- Trevisan, M. D., & Carneiro, M. C. (2009). Uma descrição semiótica da metáfora no Ensino de Biologia: asserções sobre a célula animal. *Investigações em Ensino de Ciências*, 14(3), 479-496.

- Vemulapalli, G. K. (2008). Theories of the chemical bond and its true nature. *Foundations of Chemistry*, 10(3), 167-176.
- Wang, S. G. & Schwarz, W. H. E. (2000). On closed-shell interactions, polar covalences, d shell holes, and direct images of orbitals: the case of cuprite. *Angewandte Chemie International Edition*, 39(10), 1757-1762.
- Wartha, E. J., & Rezende, D. B. (2011). Os níveis de representação no Ensino de Química e as categorias da semiótica de Peirce. *Investigações em Ensino de Ciências*, 16(2), 275-290.
- Zuo, J. M.; Kim, M.; O'Keeffe, M. & Spence, J. C. H. (1999). Direct observation of d-orbital holes and Cu-Cu bonding in Cu₂O. *Nature*, 401(6748), 49-52.

Anexo 1 – Livros didáticos de Química Geral analisados

- Atkins, P. W. & Jones, L. (2001). *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. Porto Alegre: Bookmam.
- Babor, J. A. (1943). *Química general moderna*. Barcelona: Manuel Marín.
- Bavink, B. (1928). *Introducción a la química general*. Barcelona: Labor.
- Boll, M. (1927). *Cours de chimie*. Paris: Dunod.
- Brady, J. E. & Humiston, G. E. (1986). *Química Geral*. Rio de Janeiro: LTC.
- Brown, T. L.; LeMay, H. E. Jr. & Bursten, B. E. (1999). *Química: Ciência Central*. Rio de Janeiro: LTC.
- Deming, H. G. (1939). *General chemistry: an elementary survey*. New York: John Wiley e Sons.
- Hardwick, E. R. (1965). *Química*. São Paulo: Edgard Blücher.
- Holmes, H. N. (1946). *Introductory college chemistry*. New York: The Macmillan Company.
- Kotz, J. C. & Treichel Jr., P. (1998). *Química e Reações Químicas*. Rio de Janeiro: LTC.
- Lamirand, J. & Brunold, Ch. (1927). *Cours de chimie*. Paris: Masson et Cie.
- Mahan, B. H. (1970). *Química: um curso universitário*. São Paulo: Edgard Blucher, 1970.
- Masterton, W. L. & Slowinski, E. J. (1978). *Química Geral superior*. Rio de Janeiro: Interamericana.
- McPherson, W. & Henderson, W. E. (1917). *An elementary study of chemistry*. Boston: The Atheneum Press.
- Nernst, W. (1911). *Traité de chimie générale*. Paris: Librairie Scientifique.
- O'Connor, R. (1977). *Fundamentos de química*. São Paulo: Harper e Row do Brasil.
- Ohlweiler, O. A. (1967). *Introdução à Química Geral*. Porto Alegre: Globo.
- Ostwald, W. (1924). *Compendio de química general*. Barcelona: Manuel Marín.

Partington, J. R. (1950). *Química general e inorganica*. Madrid: Dossat.

Pauling, L. (1967). *Química Geral*. Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico.

Pimentel, G. C. & Spratley, R. D. (1974). *Química: um tratamento moderno*. São Paulo: Edgard Blücher.

Puig, Pe. I. (1932). *Curso geral de química*. Porto Alegre: Livraria do Globo.

Quagliano, J. V. & Vallarino, L. M. (1979). *Química*. Rio de Janeiro: Guanabara.

Russell, J. B. (1981). *Química Geral*. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil.

Sienko, M. J. & Plane, R. A. (1968). *Química*. São Paulo: Nacional.

Slabaugh, W. H. & Parsons, T. D. (1977). *Química Geral*. Rio de Janeiro: LTC.

Recebido em: 27.05.2014

Aceito em: 21.08.2015