

O exame de duas formas mais brandas de realismo no debate da redução da química à mecânica quântica

Nelson Bejarano*

1 INTRODUÇÃO

O objetivo deste artigo é o de buscar argumentos que possam ser utilizados de forma a rejeitar a tese da redução epistemológica e ontológica da química à mecânica quântica. Após mencionarmos alguns problemas apontados contra o projeto reducionista, examinamos a tese de Lombardi e Labarca (2005), segundo a qual o internalismo de Putnam levaria a uma pluralidade ontológica que garantiria a autonomia da química. Argumentamos que não é preciso rejeitar o realismo (como faz Putnam) para defender esse pluralismo, pois este também é consistente com variedades de realismo, especialmente o realismo de entidades, e com certas especificações também com o realismo estrutural.

2 A QUÍMICA SE REDUZ À FÍSICA QUÂNTICA?

A área de filosofia da química tem se consolidado, dentro da filosofia da ciência, no último quarto de século, o que é evidenciado pela publicação de diversos livros na área, e pela existência de dois periódicos relevantes, a *HYLE - International Journal for Philosophy of Chemistry*, e a *Foundations of Chemistry*. Um dos temas de maior destaque é a questão do *reducionismo* na química, ou seja, de se o “programa de redução” da química à física pode ser realizado de maneira completa, de se os fenômenos químicos podem ser sempre explicados pelos conceitos da física, notadamente os da mecânica quântica.

De maneira geral, os reducionistas argumentam que uma reação química, por exemplo, pode ser entendida como a interação de um número imenso de moléculas de diferentes tipos, e que o comportamento observável dessa reação é a soma dos comportamentos de cada molécula e de suas interações microscópicas. Essa redução da química macroscópica à química molecular e atômica pode ser levada adiante, segundo os reducionistas, considerando que o comportamento dos átomos é descrito de maneira bastante precisa por meio da física quântica. Nesse sentido, uma reação química “nada mais é” que um grande e complexo sistema de átomos interagindo segundo as leis da física quântica. Este seria um exemplo de “redução ontológica”.

Por outro lado, é comum os reducionistas admitirem que é impossível, pelo menos na prática, reconstruir *ab initio* (ou seja, a partir de primeiros princípios) o comportamento macroscópico de uma reação bioquímica complicada, como as que envolvem proteínas. A questão de se é possível derivar teoricamente um resultado da química a partir da teoria quântica envolve a questão da “redução epistemológica”.

* Inst. de Química – Universidade Federal da Bahia, Brasil. E-mail: nelsonbejarano@gmail.com

A posição majoritária entre os químicos parece ser uma aceitação do reducionismo ontológico e uma rejeição de alguma forma de redução epistemológica. Esta concepção “tradicional” (Lombardi, Labarca, 2005, p. 133) também é expressa em Anderson (1972), no contexto da física da matéria condensada (ver Gatti, Pessoa, 2011).

Um exemplo desta posição é a afirmação do físico Paul Dirac (1929), que escreveu que “as leis físicas básicas necessárias para a teoria matemática de uma larga parte da física e da totalidade da química são completamente conhecidas [pela mecânica quântica], e a dificuldade é apenas que a aplicação exata dessas leis leva a equações complicadas demais para de serem solúveis”.

No entanto, vários autores vêm questionando essa concepção padrão. Mary Jo Nye (1993), por exemplo, argumenta que, diferentemente dos físicos, os químicos não estão apenas interessados nas propriedades gerais das moléculas, mas nas multifuncionalidades das características e comportamentos das moléculas químicas, bem como sua capacidade de gerar novos objetos. Químicos tentam não somente entender e explicar, mas também mudar o mundo. Sjöström (2007), por seu turno, aponta a química como muito mais que simplesmente uma produtora de novos materiais, e adverte para a “forma cega de redução” que tem levado um grande contingente de químicos a se declararem atomistas ou mecanicistas. A mensagem a ser extraída dessa adesão ao reducionismo ontológico é a de que o mundo microscópico é em última instância o que há de mais importante, e isso tem os seus reflexos na educação científica.

Roald Hoffmann (2007, p. 38) considera importante a comunicação das ciências com a sociedade, a despeito dessa polêmica reducionista: “Os cientistas adotaram o modo reducionista de pensar como ideologia dominante. Mas essa filosofia tem muito pouca relação com a realidade dentro da qual os próprios cientistas trabalham. E isso causa um perigo potencial ao discurso do cientista dirigido ao resto da sociedade”.

Para finalizar esta seção, podemos mencionar as várias abordagens do filósofo da química Eric Scerri. Em um trabalho de 2004, ele analisa a tentativa de redução quantitativa de propriedades químicas à mecânica quântica, enfocando a explicação das propriedades da tabela periódica. Duas propriedades são analisadas: (1) a primeira energia de ionização dos primeiros 53 elementos químicos, e (2) a energia dos orbitais 4s e 3d em função do número atômico, em especial dos elementos 19 (potássio), 20 (cálcio) e 21 (escândio).

Em relação à primeira propriedade, a primeira energia de ionização, o autor apresenta um gráfico com os dados obtidos a partir de cálculos, com o método Hartree-Fock, juntamente com os dados obtidos experimentalmente (Scerri, 2004, p. 109). Notam-se diferenças acentuadas para os as energias dos elementos entre os números 21 a 29, entre os elementos 39 a 48, e junto ao elemento 51. Fica claro que com as técnicas atuais, a mecânica quântica não consegue explicar de maneira cabal essa propriedade periódica dos elementos químicos.

Já em relação à segunda propriedade periódica, a energia dos orbitais 4s e 3d dos elementos 19, 20 e 21, observa-se uma “anomalia” no que seria esperado dos elementos. Seria esperado o preenchimento do orbital de menor energia 3d antes do preenchimento do orbital de mais energia o 4s. No entanto, o potássio ($Z=19$) não tem seus elétrons distribuídos conforme a regra de preenchimento total dos orbitais de menor energia, antes de se passar aos orbitais de maior energia. Tendo sido preenchidas a primeira e a segunda camada segundo a regra de menor energia, a terceira camada inverte a expectativa ($3p^63d^1$) e, conforme dados experimentais, apresenta uma configuração que viola o preenchimento tradicional, se apresentando então como ($3p^64s^1$). A inversão é maior para o escândio, de $Z=21$, como aparece no gráfico apresentado em Scerri (2004, p. 98). O cálculo quântico de início não previa essas inversões, o que forçou a introdução de hipóteses que justificassem um cálculo que fornecesse a inversão constatada experimentalmente. As-

sim, a derivação quântica requereu técnicas de aproximação que somente podem ser justificadas sobre uma base *pos hoc*, ou seja, sobre dados empíricos. Nesse sentido, o cálculo da mecânica quântica não consegue se firmar como um cálculo genuinamente *ab initio* (ver também discussão em Lombardi, Labarca, 2005, p. 130-1).

3 A QUESTÃO DA AUTONOMIA DA QUÍMICA

A discussão tem se intensificado nos últimos anos, e um dos pontos nevrálgicos é a questão de se o reducionismo ontológico põe em cheque a *autonomia* da ciência química frente a outras ciências da natureza, especialmente frente à mecânica quântica. Muitos filósofos da química vêm se preocupando com esta questão, que também afeta a própria autonomia da filosofia da química, como uma área importante da investigação filosófica da ciência.

A autonomia da química pode ser defendida com base na falha da redução epistemológica: nem todos os conceitos químicos e leis podem ser derivados da física. Vale a pena mencionar o clássico tratamento formal da redução de teorias apresentado por Ernest Nagel (1961, p. 336-97). Para ele, a redução é concebida como uma relação lógica entre teorias: a teoria reduzida é uma consequência lógica da teoria redutora, desde que se apresentem definições que liguem os termos da teoria reduzida aos da teoria redutora. Um exemplo tradicional é o caso de redução interteórica entre a termodinâmica e a mecânica estatística. Assim, o termo “temperatura” da termodinâmica poderia ser reduzido para termos da mecânica estatística, como o valor médio da energia cinética de um gás.

Um problema aqui é que esta redução é apenas em princípio, pois não se pode medir a energia cinética de cada uma das partículas do sistema. Geralmente, as propriedades de um sistema químico não podem ser explicadas completamente em termos das propriedades microscópicas de seus componentes físicos; quando isso for possível, a derivação é aproximada, envolvendo suposições adicionais relacionadas com dados obtidos do próprio campo da química que se pretende reduzir (condições de contorno, etc.). Em particular, Lombardi e Labarca (2005, p. 127) argumentam que noções químicas importantes como ligação química, quiralidade, estrutura molecular e orbital, entre outros, não são deriváveis de forma exata e rigorosa a partir da mecânica quântica.

Além dessa falha na redução epistemológica, pode-se também atacar a redução ontológica, como fazem os autores argentinos. Para esses filósofos, a conquista da autonomia total da química em relação à física só será alcançada quando as ontologias da química e da mecânica quântica puderem coexistir sem que a ontologia quântica seja considerada como hierarquicamente superior (Lombardi, Labarca, 2005).

4 O INTERNALISMO DE PUTNAM

Nesse contexto, entram em cena as ideias que Hilary Putnam desenvolveu a partir de 1976, conhecidas como “realismo interno”, ou melhor, *internalismo* (Putnam, 1981). O ponto fundamental é a tese de que os objetos não existem independentemente de esquemas conceituais, posição essa que é próxima à visão de Kant.

Considerar uma teoria científica como “cópia da realidade” pressupõe a existência de um mundo objetivo, completamente independente da mente humana. Mas Putnam rejeita essa possibilidade: para ele, sujeito e realidade se constroem mutuamente. As descrições da realidade serão sempre as *nossas* descrições da realidade. Não há para esse filósofo a possibilidade de uma perspectiva superior, como a do “olho

de Deus”. São os próprios homens que constroem sua ciência, através de um acúmulo, que não nega as contribuições de homens da ciência do passado.

À primeira vista, isso poderia levar a uma perspectiva relativista, onde teorias científicas seriam consideradas subjetivas. Putnam, porém, traça um caminho do meio entre o realismo metafísico e o relativismo radical, que é o internalismo.

No externalismo, o mundo existiria independente de nossos conhecimentos e de nossas teorias, e consistiria da totalidade de objetos fixados independentes de nossa mente. Haveria somente uma verdade e uma descrição completa da “maneira que o mundo é”, e essa verdade envolveria algum tipo de correspondência entre palavras e objetos e entre sentenças e fatos. Para Putnam, não faz sentido dizer que existe uma realidade independente do sujeito, pois a ontologia somente surge de um esquema conceitual. Putnam rejeita assim a concepção de verdade como correspondência entre teoria e realidade externa. Ele propõe que a verdade deve ser entendida como “aceitabilidade racional”, um elemento provindo do pragmatismo, que envolve além de critérios puramente racionais também critérios do campo da moral, da ideologia e da ética (ver Niiniluoto, 1999, cap. 7). Assim, Putnam não deve ser classificado como um “realista”, pois o termo é geralmente usado como sinônimo de “realismo externalista”, como se referindo ao mundo externo que existiria independentemente de nós.

Putnam aceita que existem várias teorias ou descrições do mundo “verdadeiras” (segundo seu critério pragmático), o que equivale a um *pluralismo ontológico*. Todas as ontologias minimamente plausíveis têm o mesmo *status* metafísico porque todas são igualmente constituídas por descrições “objetivas”. Assim, duas teorias distintas (T_1 e T_2 , por exemplo) poderiam explicar um conjunto de fenômenos naturais partindo de corpos teóricos diferentes num mesmo contexto histórico, porém, de forma autônoma e igualmente corretas, sem que devamos considerar T_1 ou T_2 como uma teoria de hierarquia mais ou menos elevada.

A ontologia da química não depende de uma ontologia fundamental, mas somente da estrutura conceitual que a constitui. O fato de que o mundo químico não se reduz ao mundo físico não significa que ambas as ontologias sejam completamente isoladas uma da outra; ao contrário, elas são interconectadas por conexões nomológicas não reducionistas, que permitem a existência de uma relação objetiva entre os mundos, mas preserva a autonomia ontológica de cada uma das ciências (Putnam, 1981, p. 138).

Reside nessas ideias o apoio que Labarca e Lombardi (2005) buscam em Putnam para defender a autonomia da química frente à física quântica: ambas têm sua própria ontologia.

Concordamos em linhas gerais com essas ideias, especialmente quanto à autonomia ontológica da química. Cremos, porém, que é também possível argumentar que esta autonomia é consistente também com uma postura mais realista externalista. Ou seja, não é preciso adotar a filosofia de Putnam para chegar à mesma conclusão de Lombardi e Labarca com relação à autonomia da química, como será argumentado a seguir.

5 O PLURALISMO EM DIFERENTES PERSPECTIVAS REALISTAS

A partir da década de 1950, com o declínio do positivismo lógico, começam a se destacar diversas concepções realistas a respeito da teoria científica, como as visões de Popper, Feigl, Sellars, Smart, Bunge, Maxwell e Putnam (antes de 1976), entre outros. Uma forma particularmente forte de realismo na ciência é chamado por Niiniluoto (1999, p. 10) de *realismo científico crítico*, que englobaria as concepções de Popper, Sellars, Bunge, Boyd, Nowak e do próprio Niiniluoto. Este último destaca diferentes teses relativas ao realismo, sendo que o conjunto dessas teses constituiria o realismo científico crítico.

R1) *Realismo ontológico*: Pelo menos parte da realidade é ontologicamente independente de mentes humanas.

R2) *Realismo semântico*: A verdade é uma relação semântica entre linguagem e realidade, no sentido de uma teoria da verdade por correspondência. O melhor indicador de verdade é dado pelos métodos sistemáticos da ciência.

R3) *Realismo teórico*: Os conceitos de verdade e falsidade são aplicáveis a todos os produtos linguísticos da investigação científica, incluindo relatos de observação, leis e teorias. Afirmações sobre a existência de entidades teóricas possuem valor de verdade.

R4) *Realismo axiológico*: A verdade é uma das metas essenciais da ciência.

R5) *Realismo crítico*: Não é fácil ter acesso à verdade, e mesmo nossas melhores teorias podem não ser verdadeiras. Mesmo assim, é possível se aproximar da verdade, e fazer avaliações racionais sobre tal processo cognitivo.

R6) *Inferência para a melhor explicação*: A melhor explicação para o sucesso prático da ciência é a suposição de que teorias científicas são de fato aproximadamente verdadeiras ou suficientemente próximas à verdade.

Nesta concepção realista, não parece haver lugar para um pluralismo teórico. Na comparação entre a concepção da química e da física quântica a respeito de uma reação química, haveria uma teoria que se aproximaria melhor da verdade, então não haveria como sustentar que as ontologias de ambas as teorias são equivalentes. Uma seria mais fundamental, e a outra seria em princípio redutível a esta.

No entanto, há algumas propostas na literatura que buscam uma forma mais branda de realismo, que aceitariam por exemplo as teses R1, R2 e R3, mas não as teses R5 e R6. Essas formas brandas incluiriam o realismo de entidades e o realismo estrutural.

O *realismo de entidades* defende que podemos defender a realidade de entidades que correspondem a termos teóricos, como elétrons, mesmo que não tenhamos certeza sobre suas propriedades reais (se é onda, ou partícula, ou os dois, etc.). Esta visão é defendida por Ian Hacking, que salienta o papel da manipulação ou intervenção prática (como num microscópio) na determinação da existência de uma entidade. Esta forma de realismo engloba também a crítica que Nancy Cartwright faz à veracidade das leis, que seriam meras aproximações. Ela aceita a existência de entidades teóricas que apareçam em explicações causais, mas declara que as leis fundamentais da física não são verdadeiras (Niiniluoto, 1999, p. 139). Outros autores classificados como realistas de entidade são Giere e Harré.

No caso de uma reação química, podemos afirmar com segurança que ela é real, mas as descrições quânticas e químicas estão em pé de igualdade, pois ambas envolvem pressuposições teóricas que são passíveis de revisão. O realista de entidades aceita a existência de entidades cuja realidade é bem confirmada pela ciência, mas não se compromete com a veracidade das leis teóricas que descrevem essas entidades. Ou seja, ele não se compromete com a veracidade da equação de Schrödinger da mecânica quântica, e se no futuro ela for modificada (por exemplo, por pequenos termos não lineares), isso não trará embaraços para o realista de entidades.

Em suma, por não se comprometer com a veracidade das teorias, o realismo de entidades sustenta bem a tese da pluralidade teórica, sem traçar uma hierarquia reducionista entre a teoria química e a quântica.

6 O REALISMO ESTRUTURAL É CONSISTENTE COM O PLURALISMO?

O *realismo estrutural*, ao contrário do realismo de entidades, defende que a ciência só tem acesso às estruturas ou relações da realidade, e não à coisa em si. Desta perspectiva, as leis científicas tornam-se os únicos elementos das teorias que podem ser interpretados realistamente (Niiniluoto, 1999, p. 133). Esta visão é defendida modernamente por John Worrall, mas há vários precursores (influenciados por Kant) como Poincaré, Russell, Schlick, e também o filósofo escocês William Hamilton, que tanto influenciou a epistemologia baseada em analogias de James Clerk Maxwell. Além desta variante “epistemológica”, há também um realismo estrutural ontológico, como em James Ladyman, que se baseia na tese de que estruturas matemáticas conjuntistas existem na realidade, e que a ciência tem acesso a essas estruturas.

O realismo estrutural afirma que as relações ou estruturas da natureza preexistem ao conhecimento humano, e podem ser descobertas pela ciência. O realismo estrutural pode atribuir uma realidade independente também para as coisas em si, mas considera que a natureza desta coisa em si é inacessível para o homem. O que é acessível são as relações matemáticas, as formas geométricas, etc. Por exemplo, não sabemos se o elétron existe, ou qual é sua natureza, mas sabemos que há experimentos que exibem regularidades (por exemplo, padrões de interferência), e que essas são explicadas por leis. Para o realista estrutural, essas leis são objetivas e são uma propriedade da realidade física.

Será o pluralismo teórico consistente com o realismo estrutural? À primeira vista, não. Por exemplo, a teoria da relatividade descobriu um novo conjunto de leis que se aplicam não só para objetos cotidianos ou planetas, como fazia a mecânica newtoniana, mas também para objetos se movendo a velocidades próximas às da luz. Para o realista estrutural, a descrição relativista é superior à newtoniana, e as leis da física clássica podem ser obtidas como aproximações, a baixas velocidades, das leis da teoria da relatividade.

No entanto, o caso da química, e sua suposta redutibilidade à mecânica quântica, apresenta um aspecto adicional. Trata-se das flutuações térmicas provindas do ambiente em torno da molécula, que faz com que muitas propriedades quânticas sejam apagadas. Por exemplo, quanticamente uma molécula de sacarose pode se encontrar em um a superposição entre seus estados dextrógiro e levógiro, mas os efeitos do ambiente provocam um colapso desta estrutura superposta a uma única estrutura. Anderson (1972) chama esta transição de “quebra de simetria”. Ao se levarem em conta esses efeitos ambientais, as leis e estruturas derivadas da teoria quântica acabam sendo isomórficas às estruturas obtidas da química, e estas são consideradas reais.

Tomemos outro exemplo, considerando a descrição fornecida pela química para uma reação envolvendo proteínas. O químico falará de ligação covalente, equilíbrio de reação, etc., e obterá as leis de reação adequadas ao sistema macroscópico sendo estudado. Consideremos agora a descrição da teoria quântica. As moléculas envolvidas podem ser tratadas através da equação de Schrödinger, mas a complexidade do sistema só permite soluções muito aproximadas. Há, porém, um ponto adicional. Para se chegar a um tratamento macroscópico, deve-se considerar o processo de “descoerência” que embaralha as correlações quânticas e transforma o sistema quântico em um sistema clássico (Primas, 1990). Ao se aplicar o formalismo para descrever tal processo, o resultado final obtido, no caso de uma reação química, será idêntico à lei macroscópica prevista pela química. Ou seja, as leis macroscópicas previstas pela cinética química clássica e pela química quântica serão idênticas. Para o realista estrutural, ambas as descrições são equivalentes, e pode-se falar em um pluralismo ontológico na descrição de reações macroscópicas.

Naturalmente, a química clássica não consegue descrever os detalhes da interação entre moléculas individuais, e neste domínio a mecânica quântica é superior. Mas há uma diferença entre este caso e o

exemplo da teoria da relatividade. No exemplo precedente, a mecânica relativística prevê uma correção minúscula para a mecânica newtoniana, mesmo para objetos com velocidades baixas. O mesmo não acontece no caso quântico, pois as correções quânticas são apagadas na passagem para o nível macroscópico, pelo processo de descoerência.

Um realista científico crítico, como Niiniluoto, poderia ainda argumentar que a descrição em termos de moléculas é ontologicamente mais fundamental do que a descrição cinética química. Mas o realista estrutural só pode julgar a partir das equações que descrevem o fenômeno, e neste caso as equações previstas são idênticas. Havendo subdeterminação das leis pelas duas teorias, ambas são ontologicamente equivalentes, para o realista estrutural.

CONCLUSÃO

Argumentamos neste artigo que a estratégia de sustentar a autonomia da química com base na defesa do pluralismo ontológico pode ser realizada não só a partir de uma visão de mundo internalista, mas também a partir de formas brandas do realismo. Isso é feito de maneira direta no realismo de entidades, que não interpreta as leis teóricas de maneira realista, resultando no pluralismo ontológico. Já no realismo estrutural a questão é mais delicada, mas argumentamos que a natureza da transição do mundo quântico para o mundo clássico também leva a um pluralismo ontológico entre as descrições da química macroscópica e da física quântica, no domínio de processos químicos macroscópicos.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi desenvolvido a partir de um estágio de pós-doutoramento no Departamento de Filosofia da USP, em 2008, com Osvaldo Pessoa Jr., a quem agradeço pela revisão e discussão do texto, especialmente pelas partes referentes à mecânica quântica. Muitas ideias aqui apresentadas se originaram das discussões do Grupo Redux.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, Philip W. More is different. *Science* **177**: 393-96, 1972.
- DIRAC, Paul A.M. Quantum mechanics of many-electron systems. *Proceedings of the Royal Society of London* **A123**: 714-33, 1929.
- GATTI, Fábio G.; PESSOA JR., Osvaldo. O debate entre as interpretações reducionista e emergentista da física. Neste volume, 2011.
- HOFFMANN, Roald [1995]. *O mesmo e o não-mesmo*. São Paulo: Unesp, 2007.
- LOMBARDI, Olimpia; LABARCA, Martín. The ontological autonomy of the chemical world. *Foundations of Chemistry* **7**: 125-48, 2005.
- NAGEL, Ernest. *The structure of science*. Nova Iorque: Harcourt, Brace & World, 1961.
- NIINILUOTO, Ilka. *Critical scientific realism*. Oxford: Oxford University Press, 1999.
- NYE, Mary Jo. *From chemical philosophy to theoretical chemistry: dynamics of matter and dynamics of disciplines, 1800-1950*. Berkeley: University of California Press, 1993.
- PRIMAS, Hans. Induced nonlinear time evolution of open quantum objects. Pp. 259-280, in: MILLER, A.I. (org.). *Sixty-two years of uncertainty*. Nova Iorque: Plenum, 1990.

PUTNAM, Hilary. *Reason, truth and history*. Cambridge: Cambridge University Press, 1981.

SCERRI, Eric. Just how *ab initio* is *ab initio* quantum chemistry? *Foundations of Chemistry* **6**: 93-116, 2004.

SJÖSTRÖM, Jesper. The discourse of chemistry (and beyond). *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry* **13**: 83-97, 2007.