

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO NORTE FLUMINENSE

DARCY RIBEIRO – UENF

CENTRO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA – CCT

LABORATÓRIO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS – LCQUI

**MONOGRAFIA DO PROJETO DE FIM DO CURSO DE
GRADUAÇÃO**

**A 2ª LEI DA TERMODINÂMICA E A POLÊMICA DO DESENHADOR
INTELIGENTE: UM EXEMPLO DE UTILIZAÇÃO IMPRECISA DO
CONCEITO ELEMENTAR DE ENTROPIA.**

LUIZ CARLOS GOMES SACRAMENTO JUNIOR

**CAMPOS DOS GOYTACAZES – RJ
FEVEREIRO – 2009**

**A 2ª LEI DA TERMODINÂMICA E A POLÊMICA DO DESENHADOR
INTELIGENTE: UM EXEMPLO DE UTILIZAÇÃO IMPRECISA DO
CONCEITO ELEMENTAR DE ENTROPIA.**

LUIZ CARLOS GOMES SACRAMENTO JUNIOR

Monografia apresentada ao Centro de
Ciência e Tecnologia da Universidade
Estadual do Norte Fluminense Darcy
Ribeiro, como parte das exigências
para conclusão do curso de graduação
em Licenciatura em Química.

Orientador:

Prof.Dr. JOSÉ GLAUCO RIBEIRO TOSTES

CAMPOS DOS GOYTACAZES – RJ
FEVEREIRO – 2009

**A 2ª LEI DA TERMODINÂMICA E A POLÊMICA DO DESENHADOR
INTELIGENTE: UM EXEMPLO DE UTILIZAÇÃO IMPRECISA DO
CONCEITO ELEMENTAR DE ENTROPIA.**

LUIZ CARLOS GOMES SACRAMENTO JUNIOR

Monografia aprovada em 18 de fevereiro de 2009.

Comissão Examinadora:

Prof. JOSÉ GLAUCO RIBEIRO TOSTES (Orientador)
UENF/ LCQUI

Prof. EDMILSON JOSÉ MARIA (Membro da banca)
UENF/ LCQUI

Prof. CARLOS ROBERTO RIBEIRO MATOS (Membro da banca)
UENF/ LCQUI

AGRADECIMENTOS

Aos meus familiares, em especial meu pai, minha mãe, minhas irmãs Krícia e Tais, minha tia Graça, minhas primas Cristiane e Joyce, meus primos Luiz Victor e Gabriel, minha madrasta Solange Duarte, e aos meus amigos especialmente Geanderson Bastos Siqueira que sempre se mostrou um verdadeiro amigo em todas as horas, Luciana Mora e Marcelo Áreas. A minha namorada Emanuele por todos momentos felizes e de total dedicação. Aos meus professores Edmilson Maria, Carlos Matos, Luis Passoni e em especial, ao meu professor, orientador e além de tudo um grande amigo José Glauco Ribeiro Tostes.

RESUMO

A presente monografia pretende fornecer uma pequena colaboração na atual polêmica do “Desenhador Inteligente” (DI). Partimos de um ponto elementar: tanto os defensores como os críticos da hipótese do DI deveriam estar suficientemente seguros nos seus conhecimentos científicos antes de utilizá-los para validar seus argumentos. Especificamente, deveriam estar seguros da utilização – em particular, muito comum nos defensores do DI – da Segunda Lei da Termodinâmica e de sua função de estado central: a entropia. É comum, em ambos os lados dessa contenda, a utilização desta Lei como se a entropia fosse um critério exclusivamente “desorganizador” (em termos da interpretação molecular da Lei) em relação a direção dos processos espontâneos na natureza, o que vai gerar argumentos no mínimo imprecisos de cada lado. Em particular, apresentamos dois exemplos de tal imprecisão em textos de defensores do DI. Utilizando literatura elementar (nível de química geral) procuramos evidenciar diversos aspectos organizadores perfeitamente articulados ao conceito chave de “maximização probabilista de entropia” (que fornece a direção dos processos naturais) que podem perfeitamente explicar a emergência espontânea de moléculas mais complexas ou organizadas a partir de sistemas mais simples.

GLOSSÁRIO, FÓRMULAS E SIGLAS

p = pressão do sistema.

T = temperatura do sistema.

V = volume do sistema.

E = energia interna do sistema.

H = entalpia do sistema = $E + pV$.

S = entropia do sistema.

G = energia livre de Gibbs do sistema = $H - TS$.

$$\Delta H = q_p$$

$$\Delta S_{\text{amb}, T} = -\Delta H/T$$

$$1^{\text{a}} \text{ Lei da termodinâmica: } \Delta E_{\text{univ}} = \Delta E + \Delta E_{\text{amb}} = 0.$$

$$2^{\text{a}} \text{ Lei da termodinâmica: } \Delta S_{\text{univ}} = (\Delta S + \Delta S_{\text{amb}}) > 0.$$

$$\Delta G_{p,T} = (\Delta H - T\Delta S) < 0 \quad \text{ou} \quad -\Delta G_{p,T}/T = (-\Delta H/T + \Delta S) > 0.$$

DI = Desenhador Inteligente.

MPE = maximização probabilista de entropia.

SUMÁRIO

Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Glossário, fórmulas e siglas	v
Introdução	1
I. Esboço da Segunda Lei da Termodinâmica: sua utilização imprecisa por defensores da hipótese do Desenhador Inteligente	3
II. Objetivos	8
III. A articulação entre características desorganizadoras e organizadoras da Segunda Lei	9
1. Grupo I: $2A \rightarrow A-A$	12
1.1) $2A \rightarrow A-A$ (exotérmica/irreversível)	12
1.2) $2A \rightarrow A-A$ (adiabática/irreversível)	16
2. Grupo II: $2A \leftrightarrow A-A$	19
2.1) $2A \leftrightarrow A-A$ (exotérmica/endotérmica/equilíbrio)	19
2.2) $2A \leftrightarrow A-A$ (adiabática/equilíbrio)	22
3. Grupo III: $2A \leftarrow A-A$	23
3.1) $2A \leftarrow A-A$ (endotérmica/irreversível)	23
Conclusão	26
Referências Bibliográficas	29

INTRODUÇÃO

As relações entre ciência moderna e religião (particularmente a religião cristã) nem sempre foram harmoniosas na civilização ocidental, desde as origens da ciência moderna há cerca de 400 anos. A separação central da modernidade ocidental talvez seja aquela separação “cartesiana” entre humanidade (ou sociedade) e natureza (Capra, 1987), onde esta última e suas leis começam a ser encaradas como totalmente isentas de qualquer característica ou intervenção humana (isto é, a natureza passa a ser vista como “neutra”, “objetiva” e não mais como anteriormente, onde ela estaria organicamente ligada aos destinos da humanidade, em geral via grandes e predominantes religiões). Daí o rótulo de “materialismo” da ciência e de suas leis universais do cosmos, por contraposição tanto à “espiritualidade” das culturas humanas (invariavelmente carregadas de religiosidade e de senso do “sagrado”), como ao próprio indivíduo humano em geral. Mas ao longo da trajetória quatrocentenária tanto da ciência moderna, como da religião (cristã, principalmente) nunca deixaram de ocorrer tentativas de conciliação a partir principalmente do lado religioso, particularmente no sentido de se procurar sinais de uma inteligência e propósito divinos nas leis científicas da natureza. Em suma, para usar uma linguagem corrente, no sentido de se procurar sinais de um “*Desenhador Inteligente*” (DI). Um dos recursos mais recorrentes às leis científicas para se detectar sinais de que tal DI é indispensável tanto na geração da vida em geral, como na geração da vida *pensante* humana, tem sido apontar uma suposta insuficiência intrínseca, não ultrapassável, da Segunda Lei da Termodinâmica quanto à possibilidade dela fornecer – por si só – uma explicação da emergência e das leis da evolução da vida na Terra, particularmente uma explicação da “complexidade” dos seres vivos.

Veremos inicialmente no tópico I, um esboço esquemático da Segunda Lei e depois dois exemplos – um de literatura religiosa e o outro que reivindica o rótulo de “literatura científica” – que enfatizam apenas o papel desorganizador da Segunda Lei e a partir dessa posição tradicional afirmam a “insuficiência” acima mencionada, a qual seria coberta ou preenchida pelo apelo a um DI ou ao menos

pela exigência de sinais de um propósito inteligente na natureza acima das suas “leis naturais”.

No tópico II forneceremos os “Objetivos” da monografia.

No tópico III, apresentaremos o núcleo central da presente monografia.

I. Esboço da Segunda Lei da Termodinâmica: sua utilização imprecisa por defensores da hipótese do Desenhador Inteligente

Como é correntemente apontado em disciplinas acadêmicas de “Química Geral” e “Físico-Química” (área da termodinâmica), esta 2ª Lei forneceria um critério físico *universal* governando a direção espontânea, irreversível – rumo ao equilíbrio termodinâmico, uma vez fixado certas condições como temperatura e pressão do sistema em estudo – dos processos naturais, aí incluídas reações químicas. Este critério universal, em termos da nossa experiência (“macroscópica”) do dia-a-dia, consiste numa tendência sempre crescente – até que se atinja o estado de equilíbrio compatível com as condições de p,T dadas – de uma propriedade presente em todos os sistemas materiais (a chamada “matéria em larga escala”): a *entropia*. Daí o famoso aforismo de Clausius: “a energia do universo é constante (1ª Lei) e sua entropia tende a um máximo (2ª Lei)”. Em última instância, as explicações dos químicos em relação a fenômenos naturais “em larga escala” (ex. reações químicas) envolvem teorias ou modelos microscópicos e mecânicos *moleculares* (isto é, onde a unidade última de interesse são as moléculas, cujas dimensões mínimas são da ordem de 10^{-8} cm, isto é, cem milhões de vezes menor que um cm). Quando se admite – o que é hoje comum na comunidade científica – que as leis do “macro” são explicáveis *completamente* pelas leis do “micro” (no caso, micromolecular), temos o que em filosofia da ciência se denomina escola do “reducionismo mecanicista”. Pois bem, através de uma área da físico-química que liga (ou melhor, reduz) o macro ao micro (molecular, no nosso caso) chamada de “Termodinâmica Estatística”, aprendemos nos textos de físico-química que a entropia de um sistema sempre cresce macroscopicamente de modo *espontâneo* porque sempre cresce – em termos *probabilísticos* – microscopicamente a *desordem ou desorganização molecular*. E quando finalmente o sistema se estabiliza atingindo seu estado de equilíbrio, a entropia atinge seu valor *máximo* (compatível com as condições p,T)

porque então o conjunto de todas as moléculas deste sistema teria atingido seu *desarranjo máximo* e, ao mesmo tempo, *mais provável*. Em outras palavras, o estado final de equilíbrio poderia ter estancado em outro desarranjo ligeiramente “menos desarranjado” ou “mais ordenado”, mas mesmo este evento “muito parecido” seria – nos sistemas macroscópicos com que lidamos – altissimamente *improvável*. Em outras palavras, a ocorrência de tal evento seria muito mais improvável do que a chance que um de nós teria de acertar na próxima “quina lotérica”. Em termos práticos, poderíamos esperar bilhões de anos para, estatisticamente, tal evento acontecer *espontaneamente*. Aqui o instrutor sempre poderá usar o famoso e trivial modelo do cesto com igual número de bolinhas brancas e pretas, partindo-se do sistema plenamente “ordenado” de bolinhas brancas em cima das pretas até, após vigoroso sacolejo, atingir espontaneamente o estado de máxima “desordem”, com as bolinhas de ambas as cores misturadas e distribuídas homogêneas no cesto. Infelizmente, não só, em geral, nos adeptos do DI, mas mesmo muitas vezes na própria comunidade docente, universitária e de nível médio, das áreas curriculares de física, química e biologia, costuma-se utilizar/ensinar o conceito de entropia como se *ele se resumisse ao quadro que acabamos de traçar*. Isto acaba levando-nos a modelos explicativos *imprecisos* de fenômenos naturais, como já iremos exemplificar logo abaixo em argumentações a favor de um DI. **Tanto defensores como críticos do DI** deveriam aprofundar mais seus conhecimentos em teorias científicas antes de utilizá-las, sem necessariamente sair de um patamar *elementar* de entendimento, como, aliás, nos propomos a aqui fazê-lo no caso da Segunda Lei da Termodinâmica.

O primeiro exemplo da utilização imprecisa da 2ª Lei, em defesa de um DI na natureza, vem de um texto religioso dos anos 60 intitulado “Veio o homem a existir por evolução ou por criação?” (1968). Vamos aqui na presente “Introdução” apenas selecionar e reproduzir as afirmações que nos parecem as mais relevantes para a nossa posterior discussão/demonstração de imprecisão no uso da Segunda Lei nos dois exemplos aqui agora fornecidos, dentro da parte principal da presente monografia adiante.

A evolução (darwiniana) afirma que a primeira partícula de vida na terra surgiu por si só de matéria inanimada [...] Existe entre os elementos na terra qualquer tendência para a evolução? Não, pois se verifica que os átomos são estáveis ou, no caso de alguns, tendem a decompor-se até se transformarem num elemento estável.

Este fato harmoniza-se com o princípio científico chamado “entropia”. Significa essencialmente que a tendência do altamente organizado é descendente, em direção ao menos organizado. Nunca há qualquer aumento da ordem sem alguma força externa. Para ilustrar isso: produzirão os elementos da terra, deixados entregues a si mesmos, algum automóvel ou mesmo uma simples engrenagem? Ao contrário, os elementos permanecem no estado em que estão. Quando são pelo homem moldados numa máquina, até mesmo a máquina, deixada sozinha, começa a decompor-se.

Para outra ilustração, tome um grande barril e o encha de pedaços de aço, vidro, borracha e outros materiais. Vire o barril milhares de vezes e abra-o. Acharia alguma vez que os materiais produziram por si sós um automóvel completo? Tudo o que encontraria invariavelmente seria uma mistura de materiais, não importa quantas vezes tentasse a experiência. Deste fato podemos deduzir uma verdade fundamental.

A matéria inanimada na terra simplesmente não procura meios para melhorar a si mesma, mas tende para um estado de neutralização e estabilidade. Tampouco ajuda apelar-se para enormes períodos de tempo. O tempo produz decadência, desintegração. Resulta na corrosão dos metais, na erosão dos penhascos. O tempo é destrutivo, não construtivo. É inimigo da evolução.

Note-se – sem maiores cuidados tomados pelos seus autores – o apelo monocórdio ao caráter desorganizador da entropia.

Passemos agora ao segundo exemplo de utilização imprecisa da Segunda Lei, selecionado de um texto recente do físico e defensor da hipótese do DI, Adauto Lourenço (Lourenço, 2007).

O primeiro ponto que nos chamou a atenção foi o uso, nas suas pgs. 29 a 31, em fenômenos *físicos* de uma “teoria das probabilidades” aparentemente lastreada apenas *matematicamente*, isto é, sem nexos aparentes com a Segunda Lei, que só será por ele apresentada cerca de 40 páginas adiante. Obviamente não existem argumentos “puramente matemáticos” em física; a matemática está lastreando formulações de *leis* da natureza. É claro que, implicitamente, a “teoria de probabilidades” apresentada por Lourenço está a serviço da Segunda Lei. E mais: fica implícito *não só o aspecto microscópico-probabilista, mas também o papel puramente desorganizador desta Lei*. Mais tarde, quando ele apresenta a Segunda Lei esse papel é explicitado, primeiramente na pág. 71: “A segunda Lei da Termodinâmica é também conhecida como lei da entropia. Na linguagem popular, entropia é a explicação do porquê as coisas normalmente vão do organizado para o desorganizado; do complexo para o simples. Num conceito científico, a entropia é o que se usa para medir se um processo é espontâneo ou não”. Depois, na pag. 90, Lourenço nos diz que: “a tendência normal (pela lei da entropia) de qualquer sistema seria a de se desorganizar. Entropia, de uma certa forma, significa medir a quantidade de desorganização de um sistema”. Apesar da linguagem bem mais técnica, voltamos a encontrar aqui a mesmíssima ênfase, no papel desorganizador da entropia, do longo trecho religioso citado na pág. anterior.

Um segundo ponto que merece reparos e que envolve uma imprecisão muito comum em textos de química geral e físico-química. Na pág. 72 Lourenço conclui:

- “1. Se a energia é constante, a entropia tende para um máximo;
2. Se a entropia é constante, a energia tende a um mínimo”.

Isto é, Lourenço utiliza – ao lado da tendência maximizante da entropia de um sistema isolado (quando então a energia é constante) – uma suposta tendência a um *mínimo de energia* quando a entropia do sistema (não mais isolado) permanece constante. Não existe esse “segundo critério” de espontaneidade.

Conforme veremos no corpo central do presente trabalho esse aparente critério lateral é *parte do mesmo e único critério universal de maximização da entropia em sistema isolado como critério de espontaneidade dos processos envolvendo fenômenos naturais*. Mas o mais irônico é que este correto entendimento da Segunda Lei vai estar por sua vez ligado – conforme também mostraremos – a uma das possibilidades de encararmos certos aspectos **organizadores** da entropia envolvendo a energia.

Podemos passar agora ao corpo do nosso texto, devidamente precedido pela apresentação do objetivo da presente monografia.

II. OBJETIVOS

A presente monografia pretende trabalhar, em patamar *elementar* de química geral, certos aspectos organizadores articulados ao conceito chave de maximização probabilista de entropia – que fornece a direção espontânea de processos naturais em termos de modelos microscópicos da matéria – que supostamente estaria associado apenas a aspectos “puramente” desorganizadores da matéria, levando então a interpretações imprecisas inclusive no caso aqui em relevo da polêmica do DI. Sem aqueles aspectos organizadores não poderíamos encontrar espontaneidade na formação de produtos mais estáveis energeticamente e mais organizados estruturalmente. Assim temos agora os objetivos específicos da presente monografia. O primeiro aspecto organizador a ser estudado está envolvido dentro do processo de maximização (probabilista) de entropia via caotização de energia cinética translacional molecular em processos espontâneos irreversíveis (exotérmicos ou adiabáticos) a temperaturas relativamente baixas (envolvendo o que chamamos de processos do Grupo I). O segundo aspecto organizador, está ligado a outro processo de maximização de entropia (agora centrado em certos efeitos espaciais ou de “posição” da entropia: a “entropia configuracional”) que estimula o equilíbrio químico, não mais a irreversibilidade, nas mesmas reações do Grupo I mas agora em temperaturas maiores “intermediárias”, e que agora compõem os processos espontâneos do Grupo II (sejam de um lado exotérmicos ou endotérmicos, sejam de outro lado adiabáticos). Finalmente, em altas temperaturas as mesmas reações tendem espontaneamente a pura e simples dissociação das espécies mais complexas (processos do Grupo III), mas – assim o destacaremos – de modo peculiar a mesma entropia configuracional acima decisiva no caso do Grupo II, mantém uma como que última, residual e tênue “resistência” da natureza à pura e simples desorganização molecular.

III. A articulação entre características desorganizadoras e organizadoras da Segunda Lei

Só existe um critério universal termodinâmico governando a direção espontânea de processos naturais: o aumento da entropia em processo ocorrendo em sistemas *isolados* (processo em que não se troca nem energia nem matéria com o “ambiente”) : $\Delta S_{\text{univ}} > 0$.

Se considerarmos agora processo ocorrendo em sistema *fechado* (apenas troca de energia com o ambiente) a p, T constantes, a variação da energia livre de Gibbs, ΔG , do sistema não isolado – em contato com seu ambiente – será negativa para processo espontâneos porque prova-se (Pimentel e Spratley, 1974) que : $\Delta G = -T\Delta S_{\text{univ}} < 0$.

Vamos basear nosso estudo elementar do papel da Segunda Lei na formação espontânea (seja em processo irreversível ou em processo de equilíbrio) de um produto mais ordenado N_2X_4 a partir de fusão a pressão e temperatura constantes de duas moléculas de NX_2 , utilizando três sistemas reacionais ($X = H, F, O$) , esquematizados abaixo segundo Pimentel e Spratley (1974):

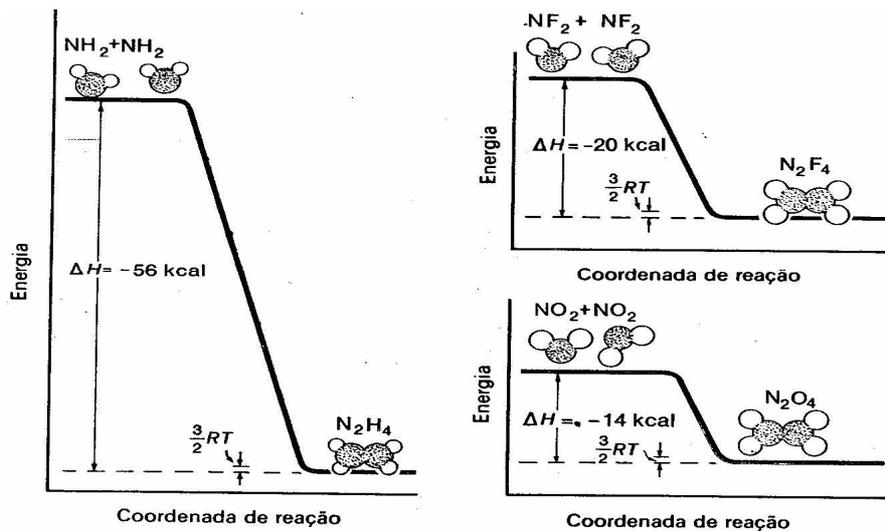


Fig.1 – esquema da fig. 8.14 de Pimentel e Spratley (1974).

Os dois mencionados autores apresentam as três reações em duas temperaturas distintas: 300 e 400 K. Os resultados quanto à extensão e direção das reações estão esquematizados abaixo:

300 K	400 K
$\text{NH}_2 + \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{H}_4$ Irreversível $2\text{A} \rightarrow \text{A-A}$	$\text{NH}_2 + \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{H}_4$ Quase irreversível $2\text{A} \rightarrow \text{A-A}$
$\text{NF}_2 + \text{NF}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{F}_4$ Quase irreversível $2\text{A} \rightarrow \text{A-A}$	$\text{NF}_2 + \text{NF}_2 \leftrightarrow \text{N}_2\text{F}_4$ Equilíbrio $2\text{A} \leftrightarrow \text{A-A}$
$\text{NO}_2 + \text{NO}_2 \leftrightarrow \text{N}_2\text{O}_4$ Equilíbrio $2\text{A} \leftrightarrow \text{A-A}$	$\text{NO}_2 + \text{NO}_2 \leftarrow \text{N}_2\text{O}_4$ Irreversível $2\text{A} \leftarrow \text{A-A}$

Fig.2 – esquema qualitativo da direção espontânea das reações da fig. 1 acima; adiante detalharemos quais as possibilidades de direção espontânea no que rotulamos de “reações de equilíbrio”.

Para complementar o estudo das reações simples acima a p, T constante, tentaremos ao menos qualitativamente delinear o esquema correspondente caso o processo reacional ocorresse, para cada uma das reações acima, seguindo o mesmo esquema da fig. 2 e *adiabaticamente* (isto é, ainda sistema fechado, mas sem troca de calor com o ambiente e sim, apenas e no máximo com trabalho mecânico do tipo $p\Delta v$), tomando a interpretação molecular entrópica do artigo de Wicken (1976) para tais processos reacionais adiabáticos semelhantes. Agora a variação de energia livre de Gibbs perde seu caráter de medida *sistêmica* de

espontaneidade da reação (pois $\Delta T \neq 0$) e como não há troca de calor com o ambiente a espontaneidade da reação fica exclusivamente por conta da variação de entropia da reação (sistema) : $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S > 0$. Em outras palavras, no esquema adiabático a geração espontânea de produtos mais ordenados tem que estar articulada a um incremento de caotização entrópica envolvendo apenas moléculas do próprio sistema reacional.

Fazendo um parêntesis, listamos os dois tipos de interpretação molecular de efeitos que contribuem para o aumento de desordem na entropia, que Pimentel e Spratley, bem como Wicken, empregam em seus respectivos trabalhos:

1 – caotização de *energia* molecular;

2 – caotização de *posição*;

2.1 – via *número* de partículas;

2.2 – via *tipos* de diferentes moléculas (efeito denominado de “entropia configuracional” por Wicken, 1976).

Grupamos, para análise, as reações do esquema da fig.2 em:

I) Processos Irreversíveis (e quase irreversíveis) exotérmicos : $2A \rightarrow A-A$;

II) Processos de equilíbrio: $2A \leftrightarrow A-A$;

III) Processos irreversíveis endotérmicos (dissociação) : $2A \leftarrow A-A$.

Este último processo não mais leva espontaneamente a produtos mais organizados, ao menos do ponto de vista das técnicas analíticas usuais da química. Os mesmos três grupamentos I, II e III (retirando apenas os termos “exotérmicos” e “endotérmicos” e a constância de T) serão praticados para análise dos correspondentes processos adiabáticos.

Chamamos a atenção para o conceito de “*processo irreversível*” : ele procede espontaneamente “até o fim” , isto é, até o consumo total do reagente inicial puro. Já “*processo de equilíbrio*” procede espontaneamente de um reagente inicial (por exemplo, partindo de A puro) até uma certa produção parcial de produto (por exemplo, A-A).

1. Grupo I: 2A → A-A

1.1) 2A → A-A (exotérmica/irreversível)

Eis as características macroscópicas básicas de tal grupo de processos (ver figs. 1 e 2);

- Processo espontâneo.
- Baixas temperaturas.
- Exotérmico.
- A p, T constante.
- Irreversível.

Eis o sumário do modelo explicativo, a partir apenas da Segunda Lei, para a produção espontânea de produto mais organizado:

Num processo com as características acima, temos uma reação química onde ocorre a formação espontânea de um produto *sistêmico* mais organizado via variação positiva da *entropia do ambiente*. Baseando-nos em Pimentel e Spratley (1974) temos que a interpretação molecular para a espontaneidade da reação deste grupo provém, via modelo simplificado, apenas do *aumento da caotização da energia cinética translacional das moléculas do ambiente*, desde que a temperatura seja suficientemente baixa (esse modelo explicativo para a contribuição entrópica via caotização de *energia* – seja do ambiente, seja do sistema – vai ser mantido ao longo do presente trabalho). Vamos então explicar este parágrafo.

Vamos considerar o balanço energético da primeira Lei da termodinâmica : $\Delta E + \Delta E_{\text{amb}} = 0$ e o balanço entrópico da Segunda Lei: $\Delta S_{\text{univ}} = (\Delta S + \Delta S_{\text{amb}}) > 0$.

A partir da primeira Lei da termodinâmica temos que a variação *negativa* da energia interna do sistema (a energia exotérmica da reação, ΔE_r), é – aproximadamente – fornecida pela diferença entre energia eletrônica do estado final (produto) e estado inicial (reagente). A energia eletrônica de cada um destes estados pode ser calculada a partir da função de onda da equação de *Schrödinger*

para o estado fundamental eletrônico da molécula em tela (produto e reagente) e pode ser considerada como a energia eletrônica a 0 K (portanto, nada tem de caótico do ponto de vista termodinâmico): a temperaturas suficientemente baixas aquela diferença de energia se mantém essencialmente inalterada. Qual a física por trás dessa energia negativa da reação? Pode ser demonstrado (Pimentel e Spratley, 1974) que a variação de energia eletrônica total (negativa) calculada quanticamente (e aproximadamente igual a ΔE_r) é igual a metade da variação correspondente (negativa) da energia *potencial* (a variação da energia cinética mecânica é igual e de sinal contrário, *positivo*, variação de energia eletrônica total). Assim sendo quem “decide” energeticamente a formação de produto mais *estável* é a queda de energia potencial devido à formação de uma nova ligação. De passagem, menciona-se que $\Delta E_r \sim \Delta H_r$, porque o trabalho mecânico ($p dv$) é em geral muito pequeno, comparativamente. Como o processo é isobárico, temos que $\Delta H_r = q_p$. Consideraremos, como o faz Pimentel, ΔE_r e ΔH_r como essencialmente invariantes com a temperatura no intervalo entre 300 e 400 K.

Pela 1ª Lei, o decréscimo na energia do *sistema* ΔE_r – liberando calor para *reservatório térmico* no ambiente, fixada a temperatura – vai ser convertido na variação *positiva* da energia de tal ambiente, ΔE_{amb} , que absorve este calor. Essa última variação da energia do ambiente compreende – aproximadamente, desde que à temperatura suficientemente baixa – a variação (única variação significativa) da energia cinética translacional das moléculas do ambiente, variação esta que poderia ser calculada a partir da termodinâmica estatística de *Boltzmann*. Note-se, cuidadosamente, que um reservatório térmico tem – hipoteticamente - capacidade calorífica “infinita” o que só permite variação caótica *local* daquela sua energia translacional, prontamente dissipada no seio das demais moléculas do reservatório de modo a se manter sua temperatura global essencialmente constante para qualquer quantidade de calor absorvido. Imagine um corpo humano (sistema) cedendo continuamente calor à água do mar (reservatório térmico) a sua volta. Adiante veremos como na reação *adiabática* correspondente, $2A \rightarrow A-A$ (adiabático/irreversível), teremos um modelo apenas sistêmico da

variação caotizante de energia cinética translacional molecular em sua contribuição para o balanço entrópico.

Agora vamos aprofundar o balanço entrópico.

Do ponto de vista do *sistema* reacional temos a formação de um produto mais ordenado (formação de uma nova e adicional ligação) e, “pior” ainda, diminui o número final de partículas no produto; portanto, é de se esperar contribuição final *negativa* de ΔS de posição (ver adiante como essa contribuição vai ser revertida em temperaturas mais altas), que não contribui, por tal motivo, para sustentar a espontaneidade do processo.

O aumento de caotização de energia cinética translacional das moléculas do *ambiente* será grande se a variação de entalpia do *sistema*, (ΔH), for bem maior (em valor absoluto) que a energia de translação molecular média ($3/2 RT$) daquelas moléculas, sendo que a variação de entropia do ambiente ($\Delta S_{\text{amb}} = -\Delta H/T$) que será então *positiva* e também a medida física daquela caotização, será também a força diretora (“driving force”) da espontaneidade/irreversibilidade dessa reação a temperaturas baixas, mais que compensando o sinal negativo de ΔS . Nota-se cuidadosamente que não é somente o valor de entalpia que decide sobre o grau de aumento de caotização energética do ambiente, pois em temperaturas altas a mesma entalpia já não leva mais a *variações* significativas de caotização da energia translacional das moléculas do ambiente, isto é, o termo $-\Delta H/T$ vai *diminuindo* com o crescimento da temperatura (metáfora do “tráfego muito desarrumado”). Nesta reação a p, T constantes a energia livre de Gibbs (ΔG) possui valor negativo (se a temperatura for suficientemente baixa), confirmando assim uma reação espontânea. Há duas contribuições para este valor negativo. Do ponto de vista conceitual é melhor apresentar essas duas contribuições através da seguinte equação: $-\Delta G/T = (-\Delta H/T + \Delta S) > 0$, que é a própria equação da Segunda Lei: $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{amb}} + \Delta S$. A nossa análise acima deu conta do sentido físico dos dois termos em oposição nesta última equação.

Em resumo, a reação se deu espontaneamente (a temperaturas suficientemente baixas) porque houve aumento de desordem no *ambiente*,

aumento suficientemente alto, para supercompensar o aumento de ordem na formação do produto (*sistema*).

O gráfico esquemático da queda de energia livre para esse grupo de processo é:

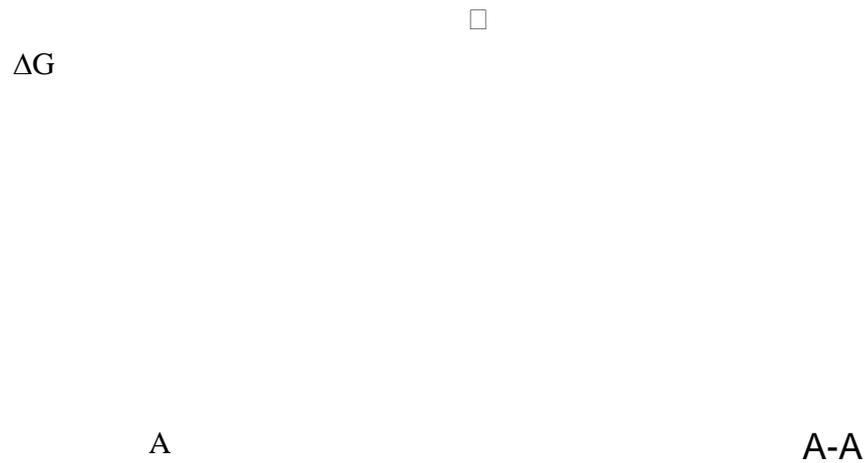


Fig. 3 – variação esquemática da energia livre de Gibbs com a concentração crescente do produto A-A na presente reação.

Vamos no próximo item analisar a mesma reação ocorrendo adiabaticamente: aí esse compromisso entre ordem e desordem ficará exclusivamente por conta do *sistema*.

1.2) 2A → A-A (adiabática/irreversível)

Eis as características básicas de tal grupo de processos (o mesmo Grupo I correspondente de reações irreversíveis isotérmicas da fig.2, agora ocorrendo adiabaticamente):

- Processo espontâneo.
- Irreversível.
- Baixas temperaturas.
- Adiabático.
- $\Delta T > 0$; p constante.

Vejamos o sumário do modelo explicativo, a partir apenas da Segunda Lei, para a produção espontânea de um produto mais ordenado:

No processo adiabático, ocorre a formação de um produto mais organizado exclusivamente via *entropia do sistema* ($\Delta S_{\text{amb}} = 0$). A interpretação molecular para espontaneidade desta reação provém da *caotização da energia cinética das moléculas do próprio sistema*, não mais do ambiente.

Vamos detalhar a seguir esse modelo explicativo, baseado em Wicken (1976):

A energia total de um sistema químico adiabaticamente isolado (isto é, que só pode trocar trabalho com o ambiente) pode ser distribuída sobre todos os níveis quânticos de energia de suas moléculas constituintes: i) níveis de energia *eletrônicos* ou, em primeira aproximação, apenas o nível de energia mais baixo de cada molécula, exclusivamente ocupado nas T “baixas” em que estamos trabalhando e ii) níveis *térmicos* de energia (translacionais, rotacionais, vibracionais) das mesmas moléculas sistêmicas. O estado deste sistema (no nosso presente caso adiabático, quando a reação “vai até o fim”, estamos nos referindo às moléculas de A-A a uma dada T final) que maximiza o número desses níveis disponíveis de energia (térmica), proporcionará a oportunidade de máxima caotização ou randomização de energia, que é a forma de maximização da entropia de que até agora tratamos; a outra é obtida via caotização da “matéria” (ou de posição), conforme veremos mais adiante. Para reações em fase líquida ou

gasosa (nosso caso), os níveis quânticos *translacionais* são espaçados muito próximos entre si de modo à efetivamente constituir um contínuo (clássico) pelo qual a energia térmica pode ser distribuída de modo aleatório. Esta dispersão de energia (*translacional*, em primeira aproximação calculada via teoria cinética dos gases ideais) constitui a “*força diretora*” (*entrópica*) para a maioria das reações químicas irreversíveis (Wicken, 1976).

Num sistema particular adiabaticamente fechado constituído originalmente por moléculas de NX_2 a energia *potencial* é alta comparada àquela do estado (final) de equilíbrio (tal como já vimos no item anterior), praticamente constituído apenas de moléculas de N_2X_4 (em determinadas condições termodinâmicas – nas quais tais reações *adiabáticas* são irreversíveis – que não necessitam ser especificadas em termos da nossa comparação entrópica apenas qualitativa com as correspondentes reações *exotérmicas*, já examinadas, de Pimentel e que na fig. 2 também “vão até o fim”); admitimos, para facilitar comparações, que cada reação adiabática começa a 300 K e depois a 400 K, com pequena quantidade de reagente para que o aumento de T seja pequeno). Do ponto de vista de uma teoria das ligações químicas, esta queda de energia potencial – tal como nas reações do item (1.1) – é uma consequência da soma total das energias de ligação no produto (N_2X_4) ser mais negativa que a mesma soma total no reagente (NX_2). Energia potencial é uma energia que pode realizar trabalho: ela não pode ser caotizada, e não pode, portanto, alterar a entropia do sistema. À medida que a reação se passa em direção à formação do produto N_2X_4 , essa energia potencial (eletrônica) decrescente – descontada a variação quântica de energia cinética eletrônica – é convertida em energia cinética que pode ser distribuída ou dispersada nos níveis de energia térmica disponíveis deste mesmo produto (particularmente nos seus níveis translacionais) provocando – macroscopicamente – um aumento na temperatura final do produto “puro”.

Tais reações adiabáticas irreversíveis correspondem às reações exotérmicas irreversíveis analisadas no item anterior. A diferença microscópica principal entre estes dois grupos de reação (o exotérmico e o adiabático) é que ao invés de aumentar a caotização da energia cinética translacional no produto (no presente

caso *adiabático*), a energia potencial disponível para trabalho no caso anterior *exotérmico* é convertida em energia cinética caotizada das moléculas de um reservatório térmico, o que aparece macroscopicamente no ambiente na forma de calor, mantendo-se então condições isotérmicas no sistema reacional. Aí está porque processos exotérmicos são em geral termodinamicamente favorecidos. Essa caotização ou randomização de energia (seja do ponto de vista da reação adiabática, seja do ponto de vista da mesma reação conduzida exotermicamente a p,T constantes) *é a mais importante contribuição entrópica de energia para a formação (espontânea!) de estruturas moleculares relativamente mais complexas (como por exemplo o N_2X_4 , isto é, X_2N-NX_2) quando seus reagentes estão na forma de elementos (como N_2 e X_2) ou, às vezes, quando eles estão na forma de estruturas poliatômicas mais simples (como o NX_2). A maximização de ligação química (ou a minimização da energia potencial molecular levando a estruturas **mais organizadas**) pode ser encarada como o meio ou instrumento pelo qual a **caotização de energia** e a sua conseqüente **maximização (sempre probabilista) de entropia** podem ocorrer. Isto parece ser uma força muito significativa na evolução química: ela dá conta naturalmente da emergência de estruturas químicas relativamente complexas, com muitas ligações, a partir de moléculas mais simples. Convém mais uma vez lembrar que esse predomínio da caotização da energia na determinação da espontaneidade/irreversibilidade na produção de sistemas mais complexos (produto A-A no nosso caso) só se dá, em geral, a temperaturas suficientemente baixas.*

Note-se que nestes processos adiabáticos não mais podemos utilizar a variação da energia livre de Gibbs do sistema como critério de espontaneidade.

2. Grupo II: 2A ↔ A-A

2.1) 2A ↔ A-A (exotérmica/endotérmica/equilíbrio)

- Processo espontâneo
- Exotérmico (quando se parte de A; quando se parte de A-A: reação endotérmica)
- Reversível (para cada T fixa, concentração final de equilíbrio é a mesma, parta-se de A ou de A-A)
- Temperaturas “intermediárias”
- Isotérmico, isobárico

No esquema da fig. 2 chegamos a condições onde:

- a reação ($\text{NF}_2 + \text{NF}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{F}_4$) a 400 K torna-se reação de equilíbrio;
- a reação ($\text{NO}_2 + \text{NO}_2 \leftrightarrow \text{N}_2\text{O}_4$) a 300 K já é reação de equilíbrio.

Pimentel e Spratley explicam em termos entrópicos tais mudanças.

Recordemos que nos casos:

- da reação ($\text{NH}_2 + \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{H}_4$) tanto a 300 como a 400 K;
- da reação ($\text{NF}_2 + \text{NF}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{F}_4$) a 300K,

já analisados anteriormente, a distribuição caótica de *energia* – operante em reservatório térmico do *ambiente* – foi o único fator entrópico relevante como “força diretora” da espontaneidade de tais reações, fator este que tem seu peso *decrecido* com o aumento de T. Agora, nas reações de equilíbrio, não é mais possível ignorar-se o peso entrópico da distribuição caótica de *posição* e verifica-se que sua importância *crece* com a temperatura. Em primeiro lugar, e contribuindo para a entropia da reação $2A \rightarrow A-A$ variar *negativamente* (o que favoreceria a reação inversa de dissociação), temos que quando duas moléculas de NX_2 unem-se através de ligações químicas, há uma considerável perda de liberdade de movimentos. Antes da ligação as duas moléculas podiam comportar-se independentemente uma da outra, tanto do ponto de vista da posição como do

ponto de vista da energia; ao formarem a molécula mais “complexa” de N_2X_4 devem compartilhar energia, situação geográfica, etc.

Como e quando pode a entropia de *posição* contribuir para a espontaneidade seja da reação irreversível $2A \rightarrow A-A$ ou, ao contrário, para sua reação inversa e irreversível de dissociação ou então para um estado final de equilíbrio entre A e $A-A$? i) Para um determinado número de átomos é intrinsecamente mais caótico ter *muitas* moléculas em vez de poucas (o que tenderia, na reação em estudo $2A \rightarrow A-A$, a favorecer a reação inversa ou de dissociação e, portanto, tenderia a “puxar” a reação irreversível direta (exotérmica) na direção contrária (endotérmica) a partir de uma certa temperatura; veja-se ainda as duas últimas frases do parágrafo anterior); ii) é também mais caótico ter vários *tipos* de moléculas (fator “diversidade” molecular) em vez de um só, o que tende a favorecer entropicamente estado final de *equilíbrio* (onde, no caso que estudamos, coexistirão moléculas de *dois* tipos: A e $A-A$ ⁽¹⁾) e não os extremos de A “puro” ou $A-A$ “puro”. iii) Vemos então que não há, no caso da reação de formação *irreversível* do produto $A-A$ a partir do reagente A , possibilidade de contribuição entrópica de *posição* favorável à sua ocorrência espontânea. São esses os fatores que fizeram com que – a partir de uma certa temperatura – as reações ($NF_2 + NF_2 \rightarrow N_2F_4$) a 400 K e ($NO_2 + NO_2 \leftrightarrow N_2O_4$) a 300 K *não* se completassem. Ao contrário, as concentrações de A e $A-A$ acomodam-se *no melhor compromisso levando em conta todos os tipos de distribuição ao acaso (seja do tipo energético, seja do tipo posicional)*. Isto leva, dentro de uma certa faixa de temperaturas “intermediárias”, a uma situação de *equilíbrio* com quantidades relativas (no caso

1 ^(□) A maioria das transformações químicas são promovidas parcialmente por aumentos na entropia configuracional que propiciam a geração de novas espécies moleculares. No caso particular da reação padrão do presente trabalho, ela gera a nova espécie $A-A$ mais complexa. Uma distribuição equimolecular de equilíbrio entre A e $A-A$ (imaginada como bolinhas brancas de A e bolinhas pretas de $A-A$) promove o número máximo de possíveis configurações em relação a qualquer outra composição de equilíbrio e, portanto, pela termodinâmica estatística, maximiza a entropia configuracional desta reação. Se essa modalidade de entropia fosse a única responsável pela espontaneidade da reação, esta seria levada a um único estado de equilíbrio (onde a entropia seria máxima): composição de equilíbrio equimolecular das duas espécies. Portanto, a promoção de novidade molecular é promovida em um sistema químico por considerações de entropia configuracional, mesmo que isto resulte em níveis mais altos de **organização molecular**.

de A e A-A) determinadas pelas contribuições entrópicas das energias e posições distribuídas ao acaso.

Portanto, a entropia de *posição* apresenta certas facetas que podem estimular também a produção *espontânea* de moléculas *mais complexas*, ainda que em concentrações mais modestas que aquelas realizáveis nas condições irreversíveis, via caotização de energia, que vimos inicialmente a T baixas.

Fornecemos esquematicamente três possibilidades (em três diferentes e crescentes temperaturas) para a curva da energia livre de Gibbs reacional versus concentração (crescente) de A-A; o mínimo de cada curva fornece a concentração (ótima do ponto de vista da energia livre mínima do sistema e da máxima entropia do universo) de equilíbrio na sua respectiva T fixada. Note como o mínimo se desloca na direção de A quando T cresce.

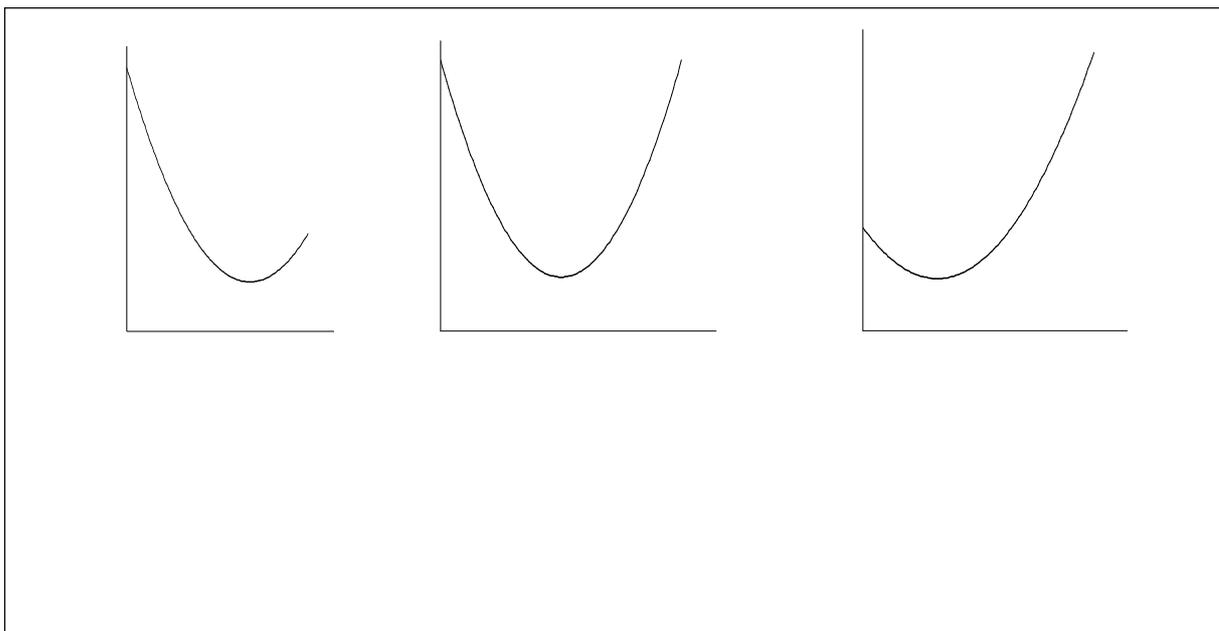


Fig. 4 – curvas esquemáticas de energia livre versus concentração crescente de A-A para três diferentes situações de equilíbrio; note-se a Temperatura crescente ao longo dos três gráficos.

2.2) $2A \leftrightarrow A-A$ (adiabática/equilíbrio)

- Adiabático
- Espontâneo
- Reversível
- Temperaturas intermediárias
- $\Delta T > 0$.

Recordemos a nossa análise da mesma reação em condições adiabáticas e a baixas temperaturas: a reação se processava irreversivelmente até A-A “puro” e a “força diretora” entrópica da reação ficava por conta da conversão de energia potencial molecular em energia cinética translacional caotizada do próprio produto A-A (com aumento da T) e não mais envolvendo caotização de energia no ambiente (calor). Assim, para a reação irreversível e adiabática, conforme vimos, toda as contribuições, positivas e negativas de entropia, provieram exclusivamente do *sistema*.

Quando, entrando na faixa “intermediária” de temperaturas, também em termos adiabáticos, começam a despontar estados finais de equilíbrio reagente-produto, pode-se concluir que também essencialmente as *mesmas* contribuições *sistêmicas* de entropia de *posição* do item anterior começam a ser operantes para impedir que a reação se complete levando até o produto final A-A “puro”. Portanto a análise destas contribuições posicionais no processo adiabático não trará novidades de interpretações microscópicas em relação àquela já realizada no item imediatamente anterior em condições não-adiabáticas. Particularmente aquelas interpretações – não tão comuns mesmo na literatura científica – apontavam: i) um papel freqüentemente negligenciado da segunda lei como um *princípio organizador para a matéria, que é capaz de dar conta da formação de complexas estruturas químicas*, e ii) *não apenas, como de costume em parte ao menos da literatura científica e da literatura defensora do DI, o papel de randomização da energia e da matéria (ou de posição) como se ele, tal papel, englobasse – inteira e completamente – a interpretação molecular da espontaneidade das reações químicas.*

3. Grupo III: 2A ← A-A

3.1) 2A ← A-A (endotérmica/irreversível)

- Dissociação espontânea
- irreversível
- endotérmico
- P,T constantes
- altas temperaturas

A temperaturas suficientemente altas todas as três reações estudadas ($\text{NH}_2 + \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{H}_4$), ($\text{NF}_2 + \text{NF}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{F}_4$), ($\text{NO}_2 + \text{NO}_2 \leftrightarrow \text{N}_2\text{O}_4$) a p e T constantes inexoravelmente tenderão, espontaneamente, à dissociação endotérmica irreversível, isto é, a etapa intermediária anterior viu – à medida que T aumentava – o equilíbrio deslocar-se paulatinamente na direção da A “puro”. Novamente, recordarmos que embora possa parecer “intuitivo” *não* é a T cada vez maior (e daí a energia de colisão molecular cada vez maior) que vai ser a força diretora para a fragmentação espontânea do sistema mais organizado A-A em duas moléculas de A (o que começa, aparentemente, a nos levar para fora do tema central do presente trabalho, que recordamos ser o seguinte: detectar princípios *organizadores* ao lado de propriedades caotizantes da entropia, o que permite à Segunda Lei explicar a formação *espontânea* de sistemas *mais* complexos). A força diretora de tal fragmentação tem que ser procurada nas entropias de caotização de energia e de posição. Vimos anteriormente que com o aumento de T vai crescendo em importância o peso de contribuições caotizantes da entropia de *posição*. E, particularmente, o peso da entropia de caotização de posição via *aumento do número de partículas no sistema reacional*, pois a entropia de posição via aumento dos tipos de moléculas no sistema reacional teve o seu arranjo maximizador de entropia no caso das reações aqui estudadas quando A e A-A atingiram – a uma dada T – a concentração equimolecular de equilíbrio (ver

nota de rodapé no item 2.1). É claro que poderá haver alguma contribuição caotizante da *energia* cinética translacional das moléculas e, agora, em T mais altas, contribuições caotizantes crescentes (até agora desprezadas) de povoamento – via Boltzmann – de níveis quânticos rotacionais, vibracionais e até eletrônicos.

Resta, ainda, um ponto notável dentro do tema da presente monografia, a ser trazido a tona quando chegamos à reação de dissociação. Segundo Wicken (1976), a termodinâmica estatística nos ensina que *nenhuma reação pode ir inteiramente até o fim*, sem deixar traços dos reagentes, porque se isso acontecesse, a contribuição entrópica devido às configurações espaciais da matéria (trata-se da entropia de caotização de posição via diferentes *tipos* de moléculas ou **entropia configuracional**) desapareceria. Um alto grau dessa caoticidade configuracional pode ser sustentada mesmo com umas “poucas” moléculas do reagente (no caso, A-A – o componente *mais* organizado – é que se torna o *reagente*). Para darmos uma idéia numérica ao leitor, podemos considerar os produtos (no caso, moléculas de A) apresentando um número de moléculas da ordem do número de Avogadro, 10^{24} (que pode ser considerado como sendo um trilhão de trilhão de moléculas: $10^{12} \times 10^{12}$); podemos considerar o produto (A-A) com a contribuição de “apenas” um trilhão de moléculas; se considerarmos agora que tal amostra está contida em 1 litro, concluiremos que a concentração molar de A-A é praticamente indetectável pelas técnicas usuais de análise química: da ordem de 10^{-12} moles/litro. Para tais técnicas, “a reação foi até o fim”. No entanto certos efeitos físicos de A-A podem ainda ser operativos mesmo em escala macroscópica, por exemplo, via sensibilidade olfativa humana ou, mais ainda, de certos animais como cães.

Assim, terminamos o corpo central de nosso trabalho com uma conclusão algo irônica dentro da discussão criacionismo x naturalismo: mesmo lá em reações a altas temperaturas de onde parece que toda e qualquer organização foi (ou está cada vez mais sendo) banida, encontramos – metaforicamente falando– uma notável resíduo final de tendência organizadora em processos químicos, devido à contribuição da **entropia configuracional**. Pelo menos até certos limites de

temperatura além dos quais “a química acaba” (isto é, limites de 10.000 a 15.000 K onde se completa a ionização dos átomos).

Não há mais praticamente interesse em tratar agora, por simetria, com reação de dissociação correspondente em termos adiabáticos.

Apresentamos abaixo um sumário geral dos três grupos (I,II,III) reacionais estudados na presente monografia.

Processos	“Geração de moléculas mais complexas”		“Dissociação”
	$2A \rightarrow A-A$	$2A \leftrightarrow A-A$	$2A \leftarrow A-A$
$p, T = \text{constantes}$ $\Delta H = q_p.$ $\Delta G_{p,t} < 0.$ $\Delta T = 0.$	<p>T baixas</p> $\Delta S_{\text{amb, Ecin}} = -\Delta H/T > 0$	<p>T intermediárias</p> $\Delta S_{\text{amb, Ecin}} \times \Delta S_{\text{pos}}$	<p>T altas</p> $\Delta S_{\text{pos}} > 0$
	<p>Reação Exotérmica</p>	<p>Exotérmica: vindo de A Endotérmica: vindo de A-A</p>	<p>Reação endotérmica</p>
<p>Adiabático</p> $q_p = 0.$ $\Delta S_{\text{amb}} = 0.$ $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S > 0.$	$\Delta S_{\text{Ecin}} > 0.$ $\Delta T > 0.$	$\Delta S_{\text{Ecin}} \text{ versus } \Delta S_{\text{pos}}$ $\Delta T > 0$: partindo de A $\Delta T < 0$: partindo de A-A	<p>Não visto</p>

Fig. 5 – sumário geral esquemático das reações estudadas

CONCLUSÃO

O núcleo da presente monografia consistiu em argumentar que *tanto defensores como críticos do DI* devem ser extremamente cautelosos na utilização de teorias científicas, em particular da Segunda Lei da Termodinâmica, em defesa de suas respectivas posições, sem necessariamente sair de um nível *elementar* de livros de química geral, como é o caso do texto que mais utilizamos no presente trabalho: Pimentel e Spratley (1974). Em particular, deve ser cuidadosamente avaliada a *possível* presença de efeitos **organizadores** articulados a entropia de caotização em processos naturais, articulação essa que pode redundar na geração espontânea de moléculas mais complexas, começando preferencialmente com moléculas *bastante pequenas*, como fizemos na presente monografia. Esses efeitos organizadores têm que estar articulados – *necessariamente* – a entropia de **caotização** de energia ou de posição ou de ambas, tal que sempre seja maximizada a entropia do universo ao final do processo em estudo. Para reações químicas, como aquela que parte de A para produzir irreversivelmente molécula mais complexa, A-A, a temperaturas relativamente baixas, vimos que a entropia de caotização da energia cinética translacional (seja nas moléculas do produto no sistema, seja nas moléculas de reservatório térmico no ambiente) pode ser instrumentalizada pela queda (essencialmente *não-térmica*) de energia potencial molecular (maximização da ligação química). Já em temperaturas mais altas a mesma produção de A-A por A é agora reação de equilíbrio. Aqui este equilíbrio, que favorece ou instrumentaliza um tipo de entropia de caotização de posição (entropia configuracional ou de maximização de tipos moleculares), pode – como no caso da “nossa” reação – levar também a produtos mais complexos. A nota de rodapé da p. 19 sintetiza esse tipo de maximização probabilista de entropia que, ao mesmo tempo, pode propiciar a emergência de estruturas com nível mais alto de organização. Pode-se falar, como Wicken (1976), nesses dois casos (processos reacionais dos Grupos I e II), em papel “organizador” da entropia, pois sem ele *não* poderia haver espontaneidade seja na formação de produtos mais estáveis energeticamente e mais organizados estruturalmente.

O presente trabalho poderá ser futuramente bastante amplificado. Vejamos algumas possíveis direções nesse sentido:

1) tanto boa parte dos cientistas defensores como boa parte dos cientistas críticos do DI utilizam *a mesma e consensual “regra básica de jogo” de modo acrítico: o método científico “empírico-indutivo”,* como único e definitivo método adequado para gerar *teorias* científicas. A *história* da ciência moderna, nesses seus cerca de 400 anos de trajetória, parece nos “contar uma outra história”: essa trajetória não parece em momento algum caracterizada pelo uso simplório de *um* único e seguro método supostamente *trans-histórico* (ver, por exemplo, Chalmers, 1983).

2) ironicamente, grande parte dos cientistas (inclusive, é o que se presume, boa parte dos que defendem o DI) ao longo desses 400 anos de história da ciência moderna, i) além do apego “religioso” (com sua correspondente sensação de segurança) a um “único” método *definitivo, trans-histórico, portanto “absoluto”* (o método empírico-indutivo ou a alternativa popperiana em seu lugar: o método hipotético-dedutivo), ii) amplificam essa “religiosidade” abrindo a perspectiva de uma “teoria *mecânica* de tudo” (ou “*theoria*”, cujo radical vem do grego “*theos*”, deus, e implica em uma espécie de *onisciência*) desde Newton – com sua lei da gravitação “*universal*” – até hoje, com os cosmólogos Weinberg e Barrow. Se a ciência oficial rechaça a “teoria do DI” como não-científica porque “religiosa”, deveria também cuidar de desestimular/eliminar do ensino e da pesquisa científicos aqueles dois “resíduos religiosos”, acima apontados, da ciência moderna. Primeira providência para tal objetivo: começar a levar a sério à filosofia/história da ciência a partir da segunda metade do séc. XX.

3) Pode-se trabalhar futuramente com a termodinâmica longe do equilíbrio de Prigogine (Prigogine e Stengers, 1984) como fonte de geração *alternativa* de ordem *espontânea* a partir do caos (isto é, processos espontâneos de formação de estruturas mais complexas), longe da lei dos grandes números de Boltzmann que vige próximo ao equilíbrio termodinâmico. Recomenda-se fortemente que defensores e críticos do DI o façam também.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CAPRA, F. (1987). Ponto de Mutação. SP: Cultrix.

CHALMERS, A. (1983). O que é ciência afinal? SP: Brasiliense.

INTERNATIONAL BIBLE STUDENTS ASSOCIATION (1968). Veio o homem a existir por evolução ou por criação? NY: Watchtower Bible and Tract Society of New York Association.

LOURENÇO, A. (2007). Como tudo começou. SP: Fiel.

PIMENTEL, G. C. & SPRATLEY, R. D. (1974). Química: um tratamento moderno. SP:EDUSP.

PRIGOGINE, I & STENGERS, I. (1984). A nova aliança. Brasília: UNB.

WICKEN, J. S. (1976), The chemically organizing effects of entropy maximization, J. Chem. Ed. **53**, 623-625.