

# Do caos à ordem: oscilações químicas, padrões e auto-organização

Raphael Nagao e Rafael C. Mori

Quando a cinética de sistemas químicos afastados do equilíbrio conjuga várias etapas elementares irreversíveis e a formação de intermediários de reação, podem surgir ciclos de retroalimentação. A interação entre os ciclos com escalas temporais distintas resulta em oscilações de concentração dos intermediários. O mais célebre sistema químico oscilante, a reação de Belousov-Zhabotinsky, desperta o interesse por exibir padrões espaço-temporais auto-organizados, cuja formação parece apresentar analogias com o processo de morfogênese. Assim, reações químicas podem mimetizar padrões formados espontaneamente em sistemas biológicos. Tais desenvolvimentos sugerem que questões como a origem da vida podem ser elucidadas com protagonismo da química. Ressalta-se, assim, o caráter frutífero dos novos paradigmas do século XX (especialmente, a ciência do caos), que reaproximaram o pensamento humano de fenômenos naturais e questões filosóficas até então alijados das explicações científicas.

► oscilações químicas, irreversibilidade, auto-organização ◀

Recebido em 17/03/2020, aceito em 06/08/2020

**N**a primeira parte desta publicação (Mori e Nagao, 2020), narramos como uma reorientação temática, em que o determinismo laplaciano deu lugar às incertezas da física moderna e do paradigma do caos, chamou a atenção da comunidade científica para fenômenos tradicionalmente negligenciados.

As ciências e a química, re-considerando tais fenômenos à luz de possibilidades preditivas apenas probabilísticas, relacionaram-nos a temas mais amplos, por exemplo, o aumento da entropia nos sistemas dinâmicos e, daí, a unidirecionalidade do tempo – lembremos, aspecto em acordo com as observações sensoriais, mas ausente nas descrições físicas clássicas e até nas modernas, geralmente voltadas aos estados de equilíbrio (no mais das vezes, estático), ironicamente infrequentes na natureza.

Ora, havendo, nesses processos irreversíveis, dependência temporal não linear, podem surgir ciclos de retroalimentação que descrevem o comportamento de diversos ritmos naturais. Como veremos, tais oscilações geram estruturas auto-organizadas, mimetizando padrões biológicos e indicando vias

para se abordar questões complexas, como a emergência da vida (Nagao e Varela, 2016).

**Em sistemas químicos, o afastamento do equilíbrio resulta também numa força restauradora que tende a minimizar a energia do sistema, não de caráter mecânico, mas atrelada à 2ª Lei da Termodinâmica, isto é, ao aumento inexorável da entropia.**

## Oscilações, equilíbrio, não linearidade e retroalimentação

Falar em oscilações nos remete, quase sempre, ao pêndulo mecânico: sistema em que o movimento de um corpo é alternado em sentidos opostos, numa mesma trajetória, em relação a uma posição média. Havendo atrito, o

corpo tende ao repouso no ponto de equilíbrio, seu estado de energia mínima, quando as forças peso e de tensão da corda se equiparam. Diante de uma perturbação, o corpo sofre uma força restauradora proporcional, e podemos classificar o sistema como um oscilador harmônico, nesse caso, de tipo amortecido, dada a presença do atrito.

Em sistemas químicos, o afastamento do equilíbrio resulta também numa força restauradora que tende a minimizar a energia do sistema, não de caráter mecânico, mas atrelada à 2ª Lei da Termodinâmica, isto é, ao aumento inexorável da entropia. Imagine a combinação de leite com café numa

xícara. Em minutos, a troca de calor entre os líquidos, a movimentação por convecção e a homogeneização por difusão conduzem a mistura a uma cor intermediária amarronzada. Quando a coloração e outras propriedades macroscópicas (como a temperatura) cessam de variar, o sistema está em equilíbrio, seu estado de menor energia. Diferentemente do pêndulo, a mistura não oscila entre o branco e o preto, evoluindo gradualmente para o marrom. Isso era esperado: tal oscilação de cores refletiria uma diminuição entrópica, violando uma das leis mais inescapáveis da ciência.

Ora, hoje conhecemos uma infinidade de reações que alternam cores periodicamente (Faria, 1995). Estariam elas em desacordo com a 2ª Lei? Não, pois os mecanismos das oscilações químicas e físicas (como no movimento do pêndulo) são distintos. Embora compartilhem uma característica essencial, a dependência matemática não linear (funções trigonométricas nos osciladores harmônicos; analogamente, funções exponenciais e quadráticas nas leis de velocidade de etapas elementares das reações irreversíveis, respectivamente, de 1ª e 2ª ordens), as diferenças sobrepujam essa semelhança. Vejamos.

No tratamento cinético de uma reação ideal, a velocidade de reação é proporcional às concentrações dos reagentes, elevadas às respectivas ordens de reação. Mas, duas situações desafiam essa aproximação: a autocatálise e a autoinibição. No primeiro caso, há retroalimentação positiva na velocidade da reação, em que a formação do produto favorece ainda mais sua geração, e sua concentração cresce até abruptamente os reagentes se esgotarem. No segundo, a retroalimentação é negativa, com o produto dificultando sua própria formação. Considere, então, várias etapas elementares acopladas e a formação de intermediários (o produto de uma etapa sendo reagente de outra), afetando diferentes reações paralelas e consecutivas. Essa atuação conjunta é suscetível a exibir ciclos de retroalimentação positiva e negativa, de forma que a interação entre os ciclos com escalas temporais distintas resulta, por fim, em oscilações de concentração dos intermediários de reação (Epstein e Pojman, 1998).

Como ilustração, vejamos o modelo de Lotka-Volterra. Proposto para a cinética de reações químicas oscilantes, ele acabou amplamente utilizado em estudos ecológicos

de dinâmicas populacionais, que usaremos como metáfora. Assim, seja  $X$  uma população de lebres (presa), que se reproduzem livremente.  $A$  é a quantidade de grama que alimenta as lebres ( $A + X \rightarrow 2X$ ) e possui valor constante, por estar em grande excesso em comparação ao seu consumo.  $Y$  é a população de lince (predador) que se alimentam das lebres ( $X + Y \rightarrow 2Y$ ), sendo  $P$  a população de lince mortos ( $Y \rightarrow P$ ). A Figura 1 representa a dinâmica resultante.

Todas as etapas são irreversíveis: lebres não se tornam grama, lince não geram lebres, lince mortos não revivem. As oscilações populacionais resultam da diferença de fase entre as reproduções de lebres e lince. Se as lebres consomem grama e se reproduzem, aumentando em número, algum tempo depois a população de lince também cresce. Com eles em maior número, as lebres são predadas mais rapidamente do que repostas pela reprodução e, então, sua população cai, o que, por sua vez, repercutirá na diminuição de lince. Com a população de lince baixa, as lebres procriam, aumentam em número e o ciclo recomeça. Observe a presença de autocatálise na procriação das duas espécies (retroalimentação positiva), associada à inibição do crescimento populacional da presa via predação (retroalimentação negativa).

Sendo a quantidade de grama finita, seu estoque será totalmente consumido pelas lebres, que sucumbirão, seguidas dos lince, por falta de presas. Observaríamos, no número populacional, oscilações amortecidas até o sistema atingir o equilíbrio, com a morte de todos os animais. Assim, para que as oscilações permaneçam estáveis, deve-se suprir continuamente o sistema com grama, o que o mantém fora do equilíbrio e sustentando o aumento de entropia.

Resumindo, oscilações químicas são possíveis. As equações que as descrevem são não lineares e regidas por ciclos de retroalimentação. Sua dinâmica se dá em condições longe do equilíbrio, com processos irreversíveis atuando conforme a 2ª Lei da Termodinâmica.

### Reação de Belousov-Zhabotinsky e auto-organização

Vejamos o exemplo clássico de reação oscilante, que se difundiu a partir de meados do século XX (Epstein e Pojman, 1998; Faria, 1995; Winfree, 1984; Zhabotinsky, 1991).

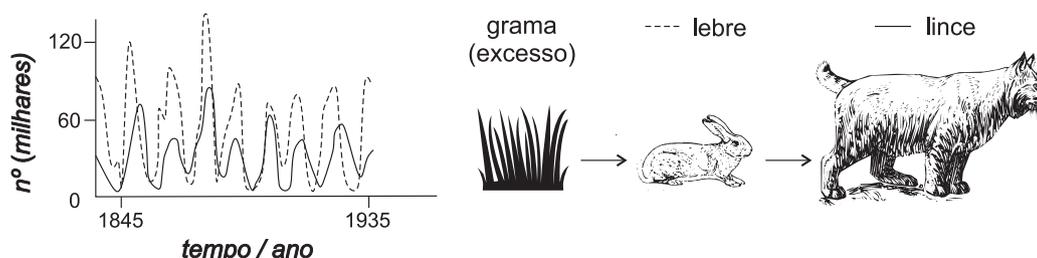


Figura 1: Evolução da população de lebres (linha pontilhada) e da população de lince (linha contínua) durante um período de 90 anos (1845-1935).

O russo Boris Pavlovich Belousov (1893-1970), estudando o ciclo de Krebs em 1951, preparou num béquer uma solução com  $\text{KBrO}_3$ ,  $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ ,  $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$  (ácido cítrico) e  $\text{H}_2\text{SO}_4$ . Instantes depois, ele observou que a cor da solução alternava periodicamente entre amarela e transparente. O fato foi relatado num artigo, seguidamente recusado, sob o argumento de que tais oscilações violariam a 2ª Lei da Termodinâmica – como vimos, uma concepção decorrente da analogia para com os osciladores físicos, como o pêndulo mecânico. As observações de Belousov seriam publicadas apenas em 1959, numa obscura antologia sobre radiação medicinal.

Por sugestão de seu orientador, o biofísico Anatol Markovich Zhabotinsky (1938-2008) veio a estudar o sistema descrito por Belousov. Zhabotinsky trocou o  $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$  por  $\text{CH}_2(\text{COOH})_2$  (ácido malônico), mostrou que as cores refletiam a mudança do estado de oxidação dos íons cério e identificou a formação de  $\text{HBrO}_2$  (ativador) como etapa autocatalítica, sendo seu consumo por íons  $\text{Br}^-$  (inibidor) a etapa inibidora. Por fim, notou que uma alíquota da solução, numa placa de Petri, exibia padrões espaço-temporais espiralados e ondas propagadas ao longo da placa – como se, na mistura de café com leite, os componentes se separassem espontaneamente!

Voltaremos a tais resultados mais adiante, cabendo ressaltar, por ora, que a comunidade custou a aceitá-los. Isso ocorreu apenas a partir de 1974, com a proposta do modelo cinético de Field, Körös e Noyes (FKN), além de simulações numéricas, justificando-se teoricamente as observações empíricas da hoje célebre reação de Belousov-Zhabotinsky (ou reação de BZ). Mais tarde, Field e Noyes, na Universidade de Oregon, simplificaram o modelo FKN em apenas 5 etapas elementares que abrangiam os aspectos gerais da reação de BZ (Faria, 1995). O novo modelo foi batizado de Oregonator, cuja proposta reacional (Field, 2007) é apresentada na Figura 2.

Modelo Oregonator	
Formulação geral	Espécies químicas
$A + Y \rightarrow X + P$	$X = \text{HBrO}_2$
$X + Y \rightarrow 2P$	$Y = \text{Br}^-$
$A + X \rightarrow 2X + 2Z$	$Z = \text{Ce}^{4+}$
$2X \rightarrow A + P$	$A = \text{BrO}_3^-$
$B + Z \rightarrow \frac{1}{2}fY$	$B = \text{CH}_2(\text{COOH})_2$
	$P = \text{HOBr}$ ou $\text{BrCH}(\text{COOH})_2$

Figura 2: Proposta do modelo Oregonator para a reação de BZ. Os destaques em cores se referem ao ativador (azul) e ao inibidor (vermelho). Note a produção autocatalítica do ativador e o seu consumo pelo inibidor.

Os reagentes e produtos  $A$ ,  $B$  e  $P$  apresentam altas concentrações, supondo-se serem constantes;  $X$ ,  $Y$  e  $Z$  são as concentrações que oscilam; e  $f$  é um parâmetro estequiométrico ajustável. Esse parâmetro deve-se à imposição da conservação de massa no sistema junto à simplificação do conjunto de reações para apenas 5 etapas elementares.

Como o modelo de Lotka-Volterra, o Oregonator cumpre os requisitos para o surgimento das oscilações: produção autocatalítica de  $X$  (retroalimentação positiva) e seu consumo por  $Y$  (retroalimentação negativa). Resumidamente, o modelo FKN abrange três processos:

1. Consumo de  $\text{HBrO}_2$  e  $\text{BrO}_3^-$  por  $\text{Br}^-$ , baixando aos poucos a concentração do inibidor;
2. Autocatálise na produção de  $\text{HBrO}_2$  e, portanto, decaimento abrupto da concentração de  $\text{Br}^-$ . Então, o catalisador é oxidado de  $\text{Ce}^{3+}$  para  $\text{Ce}^{4+}$ , sendo o crescimento autocatalítico limitado pelo desproporcionamento de  $\text{HBrO}_2$  para  $\text{BrO}_3^-$ ; e
3. Quando a concentração de  $\text{Br}^-$  atinge um valor crítico, ocorre a oxidação de  $\text{CH}_2(\text{COOH})_2$  e  $\text{BrCH}(\text{COOH})_2$ , reduzindo os íons  $\text{Ce}^{4+}$  para  $\text{Ce}^{3+}$ , e a restauração de íons  $\text{Br}^-$ , regenerando o ciclo.

A Figura 3 refere-se a um experimento da reação de BZ realizado no Laboratório de Dinâmica Eletroquímica e Conversão de Energia do Instituto de Química da Unicamp. Com a troca de  $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$  por ferroína como catalisador metálico, as cores oscilam entre vermelho e azul, associadas aos estados de oxidação do par redox  $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ . Monitorou-se as oscilações por meio de medidas de absorvância em 520 nm, dada a absorção da ferroína nesse comprimento de onda.

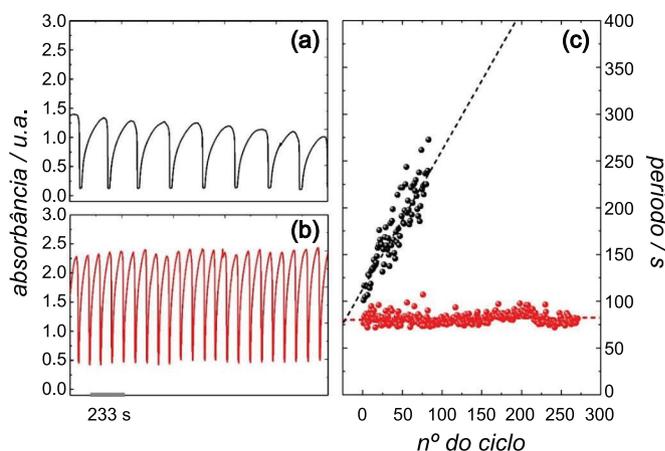


Figura 3: Medida de absorvância em 520 nm da reação de BZ conduzida em: a) batelada; b) sob alimentação contínua. O gráfico c) explicita o período das oscilações em função do número de ciclos, para esses dois regimes experimentais.

As formas de controle foram duas. A primeira (Figura 3a) representa um experimento em batelada, misturando uma quantidade pré-determinada de reagentes sem reabastecimento no curso da reação, que transcorre até seu esgotamento. No outro caso (Figura 3b), realimenta-se continuamente o sistema com reagentes, retirando-se a solução reacional à mesma taxa de abastecimento; esse tipo de controle é feito nos chamados reatores de fluxo contínuo agitado ou CSTR (do inglês, *continuous stirred-tank reactor*). As Figuras 3a e 3b mostram que a absorvância varia periodicamente, mas com diferenças na evolução do período e na amplitude das oscilações. Em batelada, a amplitude diminui a cada ciclo, enquanto o período aumenta. Já em alimentação contínua,

período e amplitude permanecem relativamente estáveis. A Figura 3c mostra como o período varia ao longo do tempo em ambos os controles.

Note-se que, em batelada, os reagentes são consumidos irreversivelmente até o equilíbrio, analogamente à competição lebres/linces com grama limitada, em que o equilíbrio significa a morte dos animais, o fim das oscilações. Já a inserção de reagentes a uma taxa constante no CSTR (especialmente o  $\text{CH}_2(\text{COOH})_2$ ) induz reações químicas irreversíveis, regidas por ciclos de retroalimentação, mantendo a dinâmica fora do equilíbrio e, portanto, as oscilações.

Distribuindo uma fina camada dessa solução numa placa de Petri, observam-se as oscilações entre o vermelho e o azul, mas sem uniformidade. Surgem as estruturas mostradas na Figura 4a: padrões espaço-temporais na forma de espirais, alvos e ondas viajantes por toda a extensão do espaço, colidindo com outras frentes de onda ou com as paredes da placa.

É notável como a estruturação espontaneamente auto-organizada da solução lembra a distribuição espacial de uma colônia de amebas *Dictyostelium discoideum* (Figura 4b). Será que os microrganismos se auto-organizam como os padrões da reação de BZ? Constitui a colônia de amebas um sistema oscilatório, como no caso da competição populacional entre linces e lebres?

Note-se que, em batelada, os reagentes são consumidos irreversivelmente até o equilíbrio, analogamente à competição lebres/linces com grama limitada, em que o equilíbrio significa a morte dos animais, o fim das oscilações.

conseguem ouvir uma instrução para se levantar, e o fazem erguendo seus braços abruptamente, sentando-se em seguida. Aqueles ao redor repetem o movimento, atrasados. No final, será observada uma “ola” – um padrão espaço-temporal. O caso da reação de BZ é análogo, pois cada micro-compartimento também possui comportamento periódico e pode se comunicar localmente. Mas trata-se de uma comunicação química, oriunda do transporte de massa difusional, isto é, diferentes localidades da reação de BZ interagem umas

com as outras dado o gradiente de concentração local de espécies. No caso das amebas, a comunicação é ditada pela liberação individual de monofosfato de adenosina cíclica, o que induz um movimento cooperativo oscilatório, resultando nos padrões (Nagano, 2000).

O ordenamento, em escala superior aos subelementos que compõem os sistemas acima mencionados, é conduzido sem nenhuma instrução externa, daí o prefixo “auto”. Observa-se, então, que muitos sistemas na natureza se comportam auto-organizadamente. A cooperação entre pessoas, animais, células, moléculas e até partículas pode estar sujeita à auto-organização se o sistema em questão estiver longe do equilíbrio termodinâmico. Como a 2ª Lei não é violada, esperar-se-ia uma situação cada vez mais desorganizada, mas, sendo os sistemas mencionados abertos (trocando matéria e energia com as vizinhanças), a entropia produzida é exportada – comentaremos isso mais adiante.

Assim, a auto-organização química parece se associar à formação de diversos padrões naturais. O matemático inglês Alan Mathison Turing (1912-1954) – considerado o pai da computação, mas cujos interesses cobriam um vasto leque – estudou essa questão pioneiramente. Seu artigo *The chemical basis of morphogenesis* (Turing, 1952) lançou fundamentos químico-matemáticos para descrever a morfogênese, o mecanismo de divisão celular que desencadeia o processo de diferenciação, criando tecidos com funções específicas. Turing propôs a formação de padrões pelo acoplamento de uma cinética de reação não linear com o transporte de massa das espécies químicas do meio reacional, como ocorre na reação de BZ.

Turing previu seis tipos de mecanismos de formação de padrões. Um deles foi batizado com seu nome, os Padrões de Turing (PT), com estruturação estacionária no tempo e oscilatória no espaço. Por sua semelhança com a distribuição espacial da pigmentação superficial de animais – como leopardos, zebras, peixes, etc., vide a Figura 5 –, os PT têm sido utilizados na compreensão do surgimento de padrões encontrados na natureza (Nagano e Varela, 2016).

Nem todo padrão pode ser descrito como um PT. Um requisito deve ser cumprido: o coeficiente de difusão das espécies inibidoras ser 8 a 10 vezes maior que o das ativadoras. Por esse motivo, 38 anos separam a proposta teórica da primeira observação experimental de um PT, com a

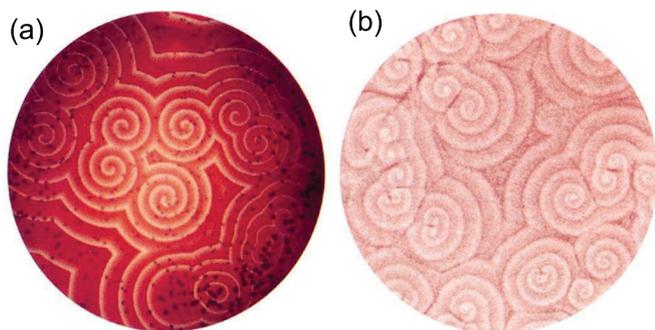


Figura 4: a) reação de BZ espacialmente estendida; b) distribuição espacial de uma colônia de amebas *Dictyostelium discoideum*. Figura adaptada de Epstein (2006) com permissão da National Academy of Sciences, direitos autorais 2006.

### Padrões de Turing e vida

Para entender a origem dos padrões auto-organizados, é preciso visualizar o sistema discretizado, em que a reação de BZ espacialmente estendida seja fragmentada, ao longo da placa de Petri, em micro-compartimentos imaginários que interagem entre si, como torcedores lado a lado numa arquibancada. Se cada torcedor possui um comportamento oscilatório e periódico, podendo estar em pé com os braços ao alto ou sentado com os braços abaixados, sua comunicação verbal permite que se combinem oscilações em fases diferentes, mas com certa sincronização. Os mais próximos

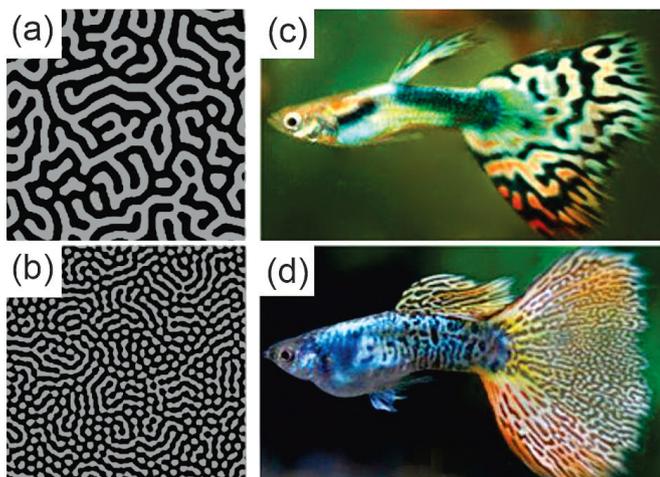


Figura 5: Padrões de Turing na forma de a) listras e b) listras e pontos, e a respectiva comparação com a distribuição espacial da pigmentação em pele de peixes mostrados em c) e d). Figura adaptada de Kondo (2017) com permissão da Elsevier, direitos autorais 2017.

reação CIMA – do inglês, *chlorite – iodide – malonic acid*. Obter essa diferença de magnitude entre coeficientes de difusão em solução aquosa é difícil, e ocorreu acidentalmente quando amido (que diminui o coeficiente de difusão dos íons ativadores) foi utilizado como indicador, por formar um complexo azulado com íons  $I^-$ .

Em suma, reações químicas simples podem mimetizar padrões complexos formados espontânea e auto-organizada em sistemas biológicos. Como mencionamos na primeira parte desta publicação, Schrödinger, em *O que é vida?*, anteviu isso, propondo que, fora do equilíbrio termodinâmico, a ordem poderia surgir por meio de uma entropia negativa ou “neguentropia” (*negentropy*) (Schrödinger, 1997). Ora, fazemos isso diariamente: alimentar-se é introduzir no corpo materiais neguentrópicos, altamente organizados (por exemplo, carboidratos), cuja queima gera energia; o resíduo metabólico, como  $CO_2$  e calor, é mais entrópico que o alimento original, por possuir mais graus de liberdade. Assim, para conservar nossos ciclos (circadianos, hormonais, cardíacos, neuronais, respiratório etc.), mantemo-nos longe do equilíbrio, ativando processos irreversíveis não lineares. A auto-organização impede que esse sistema degenera: importa-se neguentropia para as necessidades energéticas e exporta-se a entropia resultante.

Ilya Prigogine (1917-2003), laureado com o Prêmio Nobel de Química em 1977 por suas pesquisas com sistemas longe do equilíbrio termodinâmico – levando à elaboração do conceito de estrutura dissipativa, em que a ordem emerge do caos de forma semelhante ao que ocorreria nos intercâmbios energético-entrópicos imaginados por Schrödinger –, assim se expressou sobre esses achados: “podemos afirmar, hoje, que é graças aos processos irreversíveis associados à

[...] alimentar-se é introduzir no corpo materiais neguentrópicos, altamente organizados (por exemplo, carboidratos), cuja queima gera energia; o resíduo metabólico, como  $CO_2$  e calor, é mais entrópico que o alimento original, por possuir mais graus de liberdade.

flecha do tempo que a natureza realiza suas estruturas mais delicadas e mais complexas”, ou mais sucintamente, “Os processos irreversíveis desempenham um papel *construtivo* na natureza” (Prigogine, 2011, p. 30-31, grifo do autor).

Diante do exposto nesta seção, é natural que a pergunta que intitula o livro de Schrödinger, “O que é vida?”, queira ser retomada e repensada. No entanto, respondê-la permanece não sendo trivial. Sequer conseguimos definir do que se trata a vida. E, se é possível (teoricamente) haver uma diversidade de tipos de formas vivas, por enquanto só conhecemos a forma baseada no carbono. A hipótese de Oparin-Haldane foi testada com aparente sucesso no célebre experimento de Urey-Miller (que sintetizou aminoácidos a partir de uma possível atmosfera terrestre primitiva, contendo apenas  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$ ,  $NH_3$ , as substâncias da chamada “sopa primordial”), mas não houve desenvolvimentos, desde então, capazes de explicar a transição de um sistema químico orgânico para um sistema biológico vivo.

Porém, arriscamo-nos a uma certeza: essa espécie de questão não pode ser respondida apenas pela física (por seu caráter reducionista) ou pela biologia (por sua inerente complexidade). A química, aí, há de exercer protagonismo – sobretudo, porque já lançou elementos para a compreensão, ainda que de forma rudimentar, do mecanismo de construção supramolecular

que está associada às bases elementares de manutenção de seres vivos.

### Considerações finais

Ao longo das duas partes desta publicação, mostramos que as revoluções científicas do século XX colocaram em xeque a pretensão da física em busca de poder preditivo quase ilimitado, o que tornaria possível o amplo domínio da natureza. A nova ciência, ao incorporar conceitos como bifurcação, não linearidade e auto-organização, promoveu uma reaproximação do pensamento humano com fenômenos naturais e questões filosóficas que, anteriormente, estavam alijados da explicação científica.

Como demonstram nossos exemplos, a ordem pode emergir espontaneamente em condições de instabilidade, afastadas do equilíbrio. Tais condições são justamente as que cercam a maior parte dos fenômenos naturais, embora os cursos de Química (seja na educação básica, seja na educação superior) praticamente se restrinjam ao estudo de casos muito específicos, com sistemas em equilíbrio ou reações relativamente simples e tratáveis. Isso pode criar uma percepção, profundamente falsa, de que o mundo em que vivemos é atemporal e povoado de objetos que jazem em seu estado de menor energia. Na realidade, é exatamente o inverso: o mundo transborda, pulsa e esbanja aumento de entropia.

Quadro 1: Características do empreendimento científico, em seus diferentes paradigmas, da Antiguidade às revoluções científicas do século XX

Período	Campo	Conceitos	Anomalia ou desafio	Ferramentas matemáticas	Grande tema	Simetria	Lema
Antiguidade a Idade Média	filosofia da natureza	cosmos, Ser, movimento (mudança), origem/essência	paradoxos lógicos, movimento retrógrado	lógica, aritmética, álgebra, geometria euclidiana	ordem (comunidade jurídica, equilibrada e bela)	espacial	ordem a partir da ordem e desordem a partir da desordem
Modernidade	mecânica	Universo, movimento (deslocamento), órbita, experimento, previsão/controlado	problema dos três corpos	cálculo infinitesimal, geometria analítica	ordem (equilíbrio mecânico, estático)	temporal	
Transição para a Contemporaneidade	termodinâmica	máquina, movimento (atômico/molecular), estado, calor, energia, conservação, entropia	evolução num universo tendente à desordem	diferenciais de função de estado, séries	ordem (em resistência à dissipação entrópica)		
Contemporaneidade	física moderna	descontinuidade, orbital, quantização, probabilidade	paradoxos quânticos e relativísticos	operadores, matrizes, geometria não euclidiana	ordem (espaço-temporal probabilística)	espaço-temporal	ordem a partir da desordem e desordem a partir da ordem
	física, química, geociências, biologia (ciências sociais?)	iteração, bifurcação, não linearidade, auto-organização, neguentropia, estrutura dissipativa	lacuna entre auto-organização e fenômenos emergentes complexos	espaços de fases, atratores estranhos, geometria fractal	desordem (criadora/inovadora)	em escalas	

6

Assim, os processos irreversíveis intrínsecos a qualquer evento natural ditam a unidirecionalidade do tempo e induzem a organização autônoma de sistemas em multiescalas, dando origem a diversos padrões naturais. Esse novo entendimento sobre a auto-organização parece fornecer pistas para elucidar mistérios como o surgimento da vida – ainda que haja uma lacuna a ser superada, entre os desenvolvimentos teórico-práticos e essa questão essencial. Acreditamos, porém, que tal lacuna não deva desencorajar o investimento na prática científica, nem justificar o irracionalismo que, assustadora e crescentemente, tem se difundido pela sociedade. Pelo contrário: a história do pensamento humano mostra que os motores de novos desenvolvimentos são justamente as dúvidas e limites que se interpõem na trajetória científica.

Finalizando, um resumo esquemático das ideias discutidas neste artigo é apresentado no Quadro 1, que complementa

e amplia o quadro apresentado anteriormente (Mori e Nagao, 2020).

### Agradecimentos

À Fapesp (processo 2016/01817-9) e ao CNPq (processo 405235/2018-6); à Bianca T. Kitagaki, pela realização dos experimentos da Fig. 3; e aos assessores de QNEsc, por suas contribuições nas duas partes do artigo.

**Raphael Nagao** (nagao@unicamp.br), bacharel em Química, mestre e doutor em Físico-Química pela Universidade de São Paulo. É docente do Instituto de Química, da Universidade Estadual de Campinas. Campinas, SP – BR. **Rafael Cava Mori** (rafael.mori@ufabc.edu.br), bacharel e licenciado em Química, mestre e doutor em Físico-Química pela Universidade de São Paulo. É docente do Centro de Ciências Naturais e Humanas, da Universidade Federal do ABC. Santo André, SP – BR.

### Referências

- EPSTEIN, I. R. Predicting complex biology with simple chemistry. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Washington, v. 103, n. 43, p. 15727-15728, 2006.
- EPSTEIN, I. R.; POJMAN, J. A. *Introduction to nonlinear chemical dynamics. Oscillations, waves, patterns and chaos*. New York: Oxford University, 1998.
- FARIA, R. D. Introdução aos sistemas químicos oscilantes.

- Química Nova*, v. 18, n. 3, p. 281-294, 1995.
- FIELD, R. J. Oregonator. *Scholarpedia*, [s.l.], v. 2, n. 5, p. 1386, 2007.
- KONDO, S. An updated kernel-based Turing model for studying the mechanisms of biological pattern formation. *Journal of Theoretical Biology*, v. 414, p. 120, 2017.
- MORI, R. C.; NAGAO, R. Da ordem ao caos: uma reorientação das ciências e da química. *Química Nova na Escola*, v. 42, n. 4, p. 337-343, 2020.
- NAGANO, S. Modeling the model organism *Dictyostelium*

*discoideum*. *Development Growth & Differentiation*, Nagoya, v. 42, p. 541-550, 2000.

NAGAO, R.; VARELA, H. Padrões de Turing em sistemas químicos. *Química Nova*, v. 39, n. 4, p. 474-485, 2016.

PRIGOGINE, I. *O fim das certezas: tempo, caos e as leis da natureza*. Tradução de Roberto Leal Ferreira. 2. ed. São Paulo: Unesp, 2011.

SCHRÖDINGER, E. *O que é vida? O aspecto físico da célula viva* seguido de *Mente e matéria e Fragmentos autobiográficos*. Tradução de Jesus de Paula Assis e Vera Yukie Kuwajima de Paula Assis. São Paulo: Unesp, 1997.

TURING, A. M. The chemical basis of morphogenesis.

*Philosophical Transactions of the Royal Society of London B*, v. 237, n. 641, p. 37-72, 1952.

WINFREE, A. T. The prehistory of the Belousov-Zhabotinsky oscillator. *Journal of Chemical Education*, v. 61, n. 8, p. 661-663, 1984.

ZHABOTINSKY, A. M. A history of chemical oscillations and waves. *Chaos*, Woodbury, v. 1, p. 379-386, 1991.

### Para saber mais

PRIGOGINE, I. *As leis do caos*. Tradução de Roberto Leal Ferreira. São Paulo: Unesp, 2002.

**Abstract:** *From chaos to order: chemical oscillations, patterns and self-organization.* When the kinetics of chemical systems far from equilibrium combines several irreversible elementary steps and the formation of reaction intermediates, feedback loops can arise. The interaction between cycles with different time-scales results in oscillations in the concentration of intermediates. The most famous oscillating chemical system, the Belousov-Zhabotinsky reaction, arouses interest as it exhibits self-organized spatiotemporal patterns, the formation of which seems to bear analogies with the morphogenesis process. Thus, chemical reactions can mimic patterns formed spontaneously in biological systems. Such developments suggest that issues such as the origin of life can be elucidated with chemistry playing a leading role. We therefore stress the fruitfulness of the new paradigms of the 20th century (especially, the science of chaos), which brought human thinking closer to natural phenomena and philosophical issues hitherto excluded from scientific explanations.

**Keywords:** chemical oscillations, irreversibility, self-organization