

A PROPAGAÇÃO DO ERRO DO  $pK_a$  DA ÁGUA NOS LIVROS DE QUÍMICA ORGÂNICALeonardo Antonelli<sup>a,b</sup>, Rodrigo De Paula<sup>c,d</sup> e Silvio Cunha<sup>a,b,\*</sup><sup>a</sup>Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, 40170-115 Salvador – BA, Brasil<sup>b</sup>INCT de Energia e Ambiente, Universidade Federal da Bahia, 40170-290 Salvador – BA, Brasil<sup>c</sup>Centro de Formação de Professores, Universidade Federal do Recôncavo da Bahia, 45300-000 Amargosa – BA, Brasil<sup>d</sup>Universidade Federal do Oeste da Bahia, 47810-059 Barreiras – BA, Brasil

Recebido em 30/04/2023; aceito em 15/06/2023; publicado na web 31/08/2023

THE PROPAGATION OF THE ERROR IN THE  $pK_a$  OF WATER IN ORGANIC CHEMISTRY TEXTBOOKS. In organic chemistry, the  $pK_a$  is a property used to compare the acidity behavior for many substances, and to locate the position of equilibria in acid-base reactions and to provide information about structure and reactivity. Evidence in the literature shows that the values of  $pK_a$  for water and hydronium ion, commonly cited in organic chemistry textbooks, are incorrect. The values of 15.74 for  $H_2O$  and  $-1.74$  for  $H_3O^+$  are due to a propagated misconception in the equilibrium calculations while the correct values are 14.0 for  $H_2O$  and 0.0 for  $H_3O^+$ . This subtle difference of 1.74 units on the  $pK_a$  scale between both values reflects an error greater than 55 times in the level of acidity for these chemical species. An immediate correction of these values is necessary for the adequate teaching of organic chemistry. A literature search was conducted on the most used organic chemistry books in graduate and undergraduate courses in Brazil, revealing that almost all values cited were inadequate. The textbook *Chemistry of Organic Compounds*, 3<sup>rd</sup> edition (1965), by Carl Robert Noller is suggested as possible source of this misinformation in organic chemistry textbooks.

Keywords: acid dissociation constant; water chemistry; acids/bases; organic chemistry; misconceptions.

## INTRODUÇÃO

No ensino de ciências exatas, de modo muito característico nos cursos básicos da graduação, os livros didáticos cumprem um papel basilar na formação profissional. Constituem o que Kuhn<sup>1</sup> caracterizou como “manuais” cuja função é proporcionar o ensino da ciência “normal” às novas gerações de estudantes. Os livros reproduzem e reforçam o aprendizado do conjunto de teorias que explicam dados experimentais que são consagrados como corretos por uma dada comunidade de praticantes dessa ciência, até que uma revolução científica (na nomenclatura de Kuhn) substitua o fato e/ou teoria por uma nova elaboração não incremental.

Dois artigos publicados no *Journal of Chemical Education* (JCE) descrevem o erro dos valores do  $pK_a$  da água e do cátion hidrônio, presentes nos livros de química orgânica, e esclarecem de forma irrefutável a natureza conceitual do erro, conclamando os químicos orgânicos a usarem os valores corretos, Figura 1.<sup>2,3</sup>

A prevalência do erro é tão grande, e didaticamente tão deletéria ao ensino de química orgânica, que levou o atual Editor Chefe do *Journal of the American Chemical Society*, o eminente químico orgânico sintético Erick M. Carreira, a gravar um vídeo sobre o assunto junto com os dois autores para correspondência dos dois artigos do JCE aqui mencionados, de forma a popularizar os valores corretos entre os químicos orgânicos.<sup>4</sup>

A publicação dos artigos afirmando os valores corretos, espaçados por seis anos (2017 e 2023), e o reforço da divulgação através de um vídeo da *American Chemical Society* sumariando os conteúdos das duas publicações, indicam que a comunidade de químicos orgânicos ainda não fez a adesão à correção dos erros. Dessa forma, nosso primeiro objetivo é alertar os professores de química orgânica de língua portuguesa, de todos os níveis, a aderirem aos valores corretos do  $pK_a$  da água e do cátion hidrônio, mesmo que os valores errados estejam presentes no livro texto adotado no seu curso.

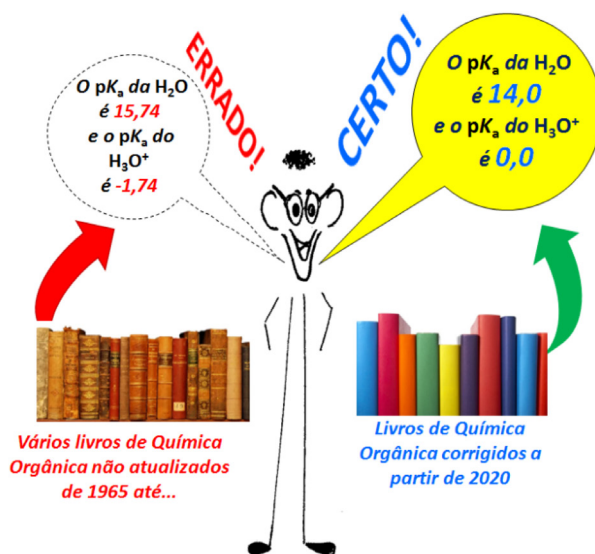


Figura 1. Valores corretos e errados do  $pK_a$  da água e do cátion hidrônio presentes nos livros<sup>2,3</sup>

Os artigos do JCE esclarecem a natureza conceitual do erro e oferecem uma provável explicação para a origem da propagação do erro nos livros de química orgânica em língua inglesa.<sup>2,3</sup> Contudo, a origem proposta parece incompleta, e apresentamos aqui dados que sugerem mais de uma origem para a propagação do erro. Adicionalmente, investigamos o cenário nos livros didáticos de autoria de pesquisadores atuando no Brasil.

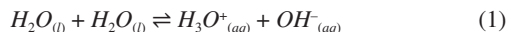
## O ensino da acidez da água no curso de química geral no Brasil

Nos cursos introdutórios de Química Geral das instituições de ensino superior brasileiras, são trabalhadas as definições de ácidos e bases, pois este é um assunto que abrange todas as áreas

\*e-mail: silvioddc@ufba.br

da Química. No entanto, alguns livros didáticos adotados para esta disciplina abordam de diferentes formas o assunto, o que pode causar divergência no ensino.

Dentro das diferentes teorias sobre classificação de substâncias com caráter ácido ou básico, é fundamental que se discuta a reação de autoionização ou autoprotólise da água, Equação 1:



A exemplo, na obra *Química: A Ciência Central*, Brown et al.,<sup>5</sup> explicam – no capítulo correspondente ao Equilíbrio Químico – que sólidos puros e líquidos puros possuem concentração constante, por isso, são excluídos da expressão matemática que descreve o equilíbrio. O argumento usado pelo autor faz jus ao fato de que, para substâncias puras (sólidas ou líquidas), a massa é proporcional ao volume e, por isso, a relação m/V é sempre constante, uma vez que a expressão é dependente da concentração molar. Posteriormente, em um único parágrafo, os autores mencionam sobre a atividade ( $a_i$ ) que possui o valor 1 para substâncias puras. Já na obra *Química Geral e Reações Químicas* de Kotz et al.,<sup>6</sup> os autores creditam a análise da reação apresentada na Equação 1 a Friedrich Kohlrausch e, ao apresentar o valor consagrado da constante de autoionização da água ( $K_w$ ), os autores remetem o estudante ao capítulo de “Equilíbrio Químico”, onde há caixas de texto com breve explicação sobre o fato de  $K_w$  ser adimensional, justificando a explicação na Termodinâmica e mencionando sobre o uso da atividade ( $a$ ) ao invés da concentração ( $C$ ).

Outra obra adotada é *Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente*, de Atkins e Jones.<sup>7</sup> Neste livro, os autores são mais cuidadosos e apresentam  $K_w$  com o rigor exigido pela Termodinâmica (Equação 2):

$$K_w = \frac{a_{H_3O^+} \times a_{OH^-}}{a_{H_2O}} \quad (2)$$

e, em uma breve explicação, justificam o motivo pelo qual essa expressão se torna:

$$K_w = [H_3O^+][OH^-] = 1,0 \times 10^{-14} \quad (3)$$

Considerando a divergência de abordagem entre os diferentes livros, torna-se fundamental que o docente amplie a discussão, apresentado os argumentos corretos, com os formalismos matemáticos e conceituais adequados para que o estudante compreenda a importância dessa informação.

A Equação 2 é a expressão mais acertada para representar o equilíbrio químico. Para tanto, é importante definir o que é atividade, que é a quantidade real de entidades químicas efetivamente em solução, sem sofrer interações com outras entidades químicas (somente com o solvente).<sup>8,9</sup> Em soluções diluídas (ou seja, com concentração molar inferior a 0,1 mol dm<sup>-3</sup>), a Lei de Henry<sup>10</sup> pode ser escrita como:

$$\mu_i = \mu_i^\circ + RT \ln a_i \quad (4)$$

onde  $\mu_i$  e  $\mu_i^\circ$  são os potenciais químicos da entidade  $i$  em solução e em condição padrão, respectivamente.

A condição padrão é dada pela temperatura de 25 °C e pressão de 1,0 bar.<sup>8-10</sup> e a atividade  $a_i \rightarrow \chi_i$  em soluções infinitamente diluídas (sendo  $\chi_i$  a fração molar da entidade  $i$ ). Porém, tecnicamente, a atividade  $a_i$  é dada como:<sup>4</sup>

$$a_i = \frac{\gamma_i m_i}{m_i^\circ} \quad (5)$$

onde  $\gamma_i$  é o coeficiente de atividade e  $m_i$  é a molalidade das substâncias  $i$  e,  $m_i^\circ$  é a molalidade padrão da substância  $i$ . Molalidade é uma medida de concentração dada em quantidade de soluto (em mol) dividido pela massa do solvente (em quilograma). A molalidade no estado padrão para substâncias puras é igual a 1,0. Portanto, a Equação 5, pode ser reescrita como:

$$a_i = \gamma_i m_i \quad (6)$$

e para soluções infinitamente diluídas,  $\gamma_i \rightarrow 1$  e a atividade, por sua vez, se torna a própria molalidade e, assim, chegamos à Equação 2. Por este mesmo motivo, justifica-se o fato de  $K_w$  ser adimensional.

A partir das considerações de diluição do sistema, pode-se aproximar as molalidades à concentração molar. Daí, a Equação 2 poderá ser reescrita na forma da Equação 3.

O valor de  $K_w = 1,0 \times 10^{-14}$  é, portanto, um valor atribuído na condição padrão e para a água pura. No entanto, pelo rigor da Termodinâmica, o equilíbrio químico é um ponto onde a energia livre do sistema é nula; para o caso da energia livre de Gibbs,  $dG = VdP - SdT = 0$ .<sup>5</sup> Assim, qualquer variação na pressão e na temperatura acarretarão alterações na posição de equilíbrio. A exemplo, para 10 e 60 °C, os valores de  $K_w$  são  $0,31 \times 10^{-14}$  ( $pK_w = 14,51$ ) e  $11,04 \times 10^{-14}$  ( $pK_w = 12,96$ ), respectivamente.<sup>7</sup> Para a água do mar padrão, o valor de  $K_w$  é de  $1,74 \times 10^{-14}$  ( $pK_w = 13,76$ ).<sup>6</sup> Porém, assumir qualquer valor fora da condição-padrão, perde-se os efeitos de comparação com os demais trabalhos publicados. Como veremos adiante, o cálculo realizado que produz o valor do  $pK_a$  da água como sendo 15,74 não leva em consideração os argumentos termodinâmicos aqui apresentados.

Ainda que o valor de  $1,0 \times 10^{-14}$  esteja correto dentro dos argumentos termodinâmicos, vale ressaltar que é imprescindível que o docente explore para além das aplicações que fazem parte do cotidiano das pessoas, da Química e da indústria; mas também, que apresente os fatos históricos e cientistas envolvidos nas medidas de acidez, na criação das escalas de pH e, sempre que possível, do formalismo matemático que fundamenta a Termodinâmica.

Dentre os diversos nomes associados aos estudos termodinâmicos de soluções durante os séculos XIX e XX, é de se destacar as contribuições científicas dos estudos conduzidos por François-Marie Raoult, que possibilitou avanços nos estudos de Jacobus H. Van't Hoff e outros, incluindo Svante Arrhenius. Os trabalhos de Arrhenius permitiram que, mais tarde, Friederich Kohlrausch e Adolf Heydweiller determinassem o valor de  $K_w$  a partir de medidas de condutância, alcançando valores próximos a  $1,0 \times 10^{-14}$  a 25 °C.<sup>11</sup> Para além dos aspectos termodinâmicos, não se pode subestimar o impacto da contribuição de Lewis para o tema ácidos e bases.<sup>12</sup>

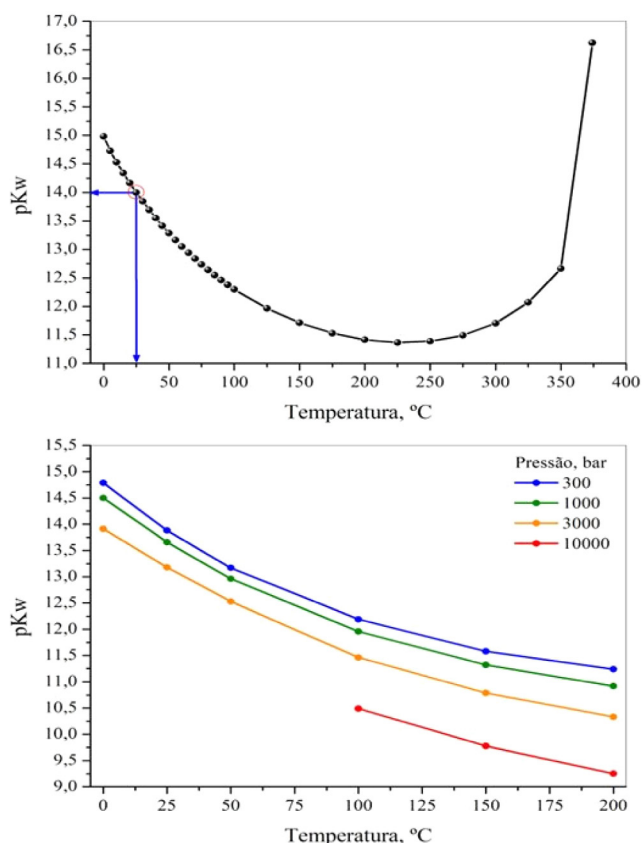
Considerando o equilíbrio dado pela Equação 01, pode-se aplicar os conceitos da Termodinâmica ( $D_r G = 0$ ), que resulta na Equação 7:

$$K_{equil} = e^{-\Delta_r G^\circ / RT} \quad (7)$$

O que demonstra a dependência de  $K_{eq}$  (nesse caso,  $K_w$ ) com a temperatura. Na prática, a constante sofre variação, também, da pressão, ainda que em menor extensão. A Figura 2 apresenta as variações observadas em  $K_w$  com a temperatura (a) e pressão (b). Além da pressão e da temperatura, o efeito da força iônica também exerce papel na acidez da água. Esta discussão está fora do escopo deste artigo, que se encontra detalhada no trabalho de Hawkes.<sup>10</sup>

### O cenário do erro no $pK_a$ da água e do cátion hidrônio nos livros traduzidos ou escritos por pesquisadores no Brasil

Em *A Importância do Ato de Ler*, Paulo Freire<sup>13</sup> enfatiza que



**Figura 2.** Variação do  $pK_w$  da água pura com: (a) temperatura e; (b) em diferentes temperaturas e pressões. Dados obtidos a partir da literatura<sup>6</sup>

“linguagem e realidade se predem dinamicamente. A compreensão do texto a ser alcançada por sua leitura crítica implica a percepção das relações entre o texto e o contexto” e enfatiza a participação ativa do leitor com “reflexões em torno da importância do ato de ler, que implica sempre percepção crítica, interpretação e reescrita do lido”.

Com a premissa de a leitura crítica prover a compreensão do texto descritivo da realidade através da linguagem científica, foi analisada uma amostra representativa de livros de química orgânica para a graduação, traduzidos do inglês, bem como um conjunto de livros que não foram traduzidos, mas que são empregados em cursos de pós-graduação e em cursos avançados da graduação em química.

A Figura 3 apresenta os valores dos  $pK_a$  da água e do cátion hidrônio (quando disponível) nos livros consultados, tanto dos traduzidos quanto dos escritos por pesquisadores no Brasil.<sup>14-42</sup> A tradição brasileira de escrever livro didático para o ensino de química orgânica é recente, quando comparada à de nações produtoras de ciência a mais tempo, com universidades bem mais antigas. Até onde conseguimos rastrear em bibliotecas públicas e privadas, o número de livros de química orgânica originais do Brasil é muito pequeno.<sup>16,18,23-26</sup>

Como se pode verificar, o erro é recorrente e os valores errados das constantes  $pK_a(H_2O)$  15,74/ $pK_a(H_3O^+)$  -1,74 prosperaram como válidos e verdadeiros no ensino de química orgânica. Apenas 15% (4 de 29 livros) dos livros consultados informam o valor correto do  $pK_a$  da água e 11% (3 de 29) do cátion hidrônio, sendo que apenas um destes livros, traduzido do inglês (o Carey), é dedicado ao ensino básico de química orgânica, Figura 3.<sup>19</sup>

Os valores das constantes  $pK_a(H_2O)$  e  $pK_a(H_3O^+)$  são amplamente ensinados e empregados na racionalização de fatos químicos. Por exemplo, o julgamento da acidez ou basicidade (grandezas termodinâmicas) relativas de duas espécies é também correlacionado

com a reatividade relativa delas, como no julgamento do poder nucleofílico (grandeza cinética) entre duas espécies.

### As origens da propagação do erro nos livros e a necessidade da correção do $pK_a$ da água e do cátion hidrônio

O livro texto ocupa um lugar de destaque no imaginário da comunidade escolar. Nas ciências exatas assume, segundo Kuhn,<sup>1</sup> uma situação singular, pois “quando falo de fonte de autoridade, penso sobretudo nos principais manuais científicos... Referem-se a um corpo já articulado de problemas, dados, teorias e muito frequentemente ao conjunto particular de paradigmas aceitos pela comunidade científica na época em que esses textos foram escritos.” Em função do papel que precisa cumprir, não é adequado que o livro didático apresente dados experimentais errados ou teorias obsoletas.

A dualidade de valores para uma mesma constante gera insegurança no educando, ainda mais quando livros didáticos da mesma ciência explicitam valores díspares. Não vamos aqui analisar amiúde as consequências pedagógicas desse erro, pois esta reflexão foi realizada pelos mesmos autores dos dois artigos mencionados do JCE, em um manuscrito em construção que será publicado em breve.<sup>3</sup> Bastam aqui dois exemplos. A dedução do valor errado 15,74 do  $pK_a$  da água é explicitada em alguns livros de química orgânica e, na Figura 4a, fazemos a reprodução. Os motivos que conduzem a esta dedução aparentemente tão convincente do ponto de vista matemático, mas desprovida de real sentido químico, foram detalhadas nas publicações do JCE e não necessitam ser aqui repetidas.<sup>2,3</sup>

Para exemplificar como o emprego dos valores errados leva a conclusões desconectadas da realidade experimental, são analisados os comportamentos de  $HNO_3$  e  $CH_3OH$ , Figura 4. Se o estudante usar o valor errado -1,74 para o  $pK_a$  do cátion hidrônio e prever a posição do equilíbrio para a equação química que representa o comportamento do  $HNO_3$  em água, chegará à conclusão (errada) de que o  $HNO_3$  ( $pK_a$  -1,3) se dissocia em água formando um ácido mais forte (o  $H_3O^+$  de  $pK_a$  -1,74), o que não faz sentido pois, experimentalmente, o  $HNO_3$  se dissocia completamente em água (na Figura 4c, compare os valores da  $K_{eq}$  da equação direta e inversa calculada empregando os valores errados e corretos dos  $pK_a$ ! Os livros silenciam quanto a esta inconsistência de formar um ácido mais forte com o valor errado do  $pK_a$  do cátion hidrônio, mesmo que a argumentação de formação de um ácido mais fraco seja empregada como critério para decidir a posição do equilíbrio de várias reações ácido-base.

Na formação de metóxido de sódio por meio da reação de  $CH_3OH$  com  $NaOH$ , o valor errado 15,74 sugere ser possível formar uma quantidade significativa de metóxido de sódio, quando o  $K_{eq}$  para a reação inversa é, de fato, 35! Se os valores da constante para as reações direta e inversa fossem 1,58 e 0,63, como sugerem os valores errados do  $pK_a$  da água empregado para seus cálculos, Figura 4d, seria possível usar metóxido de sódio em solventes não anidros e sem a necessidade de atmosfera inerte, situação que todo químico que já empregou este reagente sabe que são necessárias para o sucesso do experimento (e como explicam os reais valores das constantes diretas e inversa 0,03 e 34,67, respectivamente).

Outra forma de se verificar a inadequação do valor do 15,74 para o  $pK_a$  da água é através do cálculo da constante de equilíbrio para a reação entre o metanol e o hidróxido através do método termodinâmico, Figura 5, onde o valor 0,0288 é encontrado, em concordância com o valor obtido na Figura 4 (que aproximamos para 0,03) ao ser empregado o valor correto do  $pK_a$  da água para o cálculo de  $K_{eq}$  empregando os valores de  $pK_a$  do ácido produto e do ácido reagente, Figura 4b.

Os exemplos da Figura 4c-4d revelam que o emprego dos valores errados (15,74 e -1,74) desconectam as conclusões obtidas

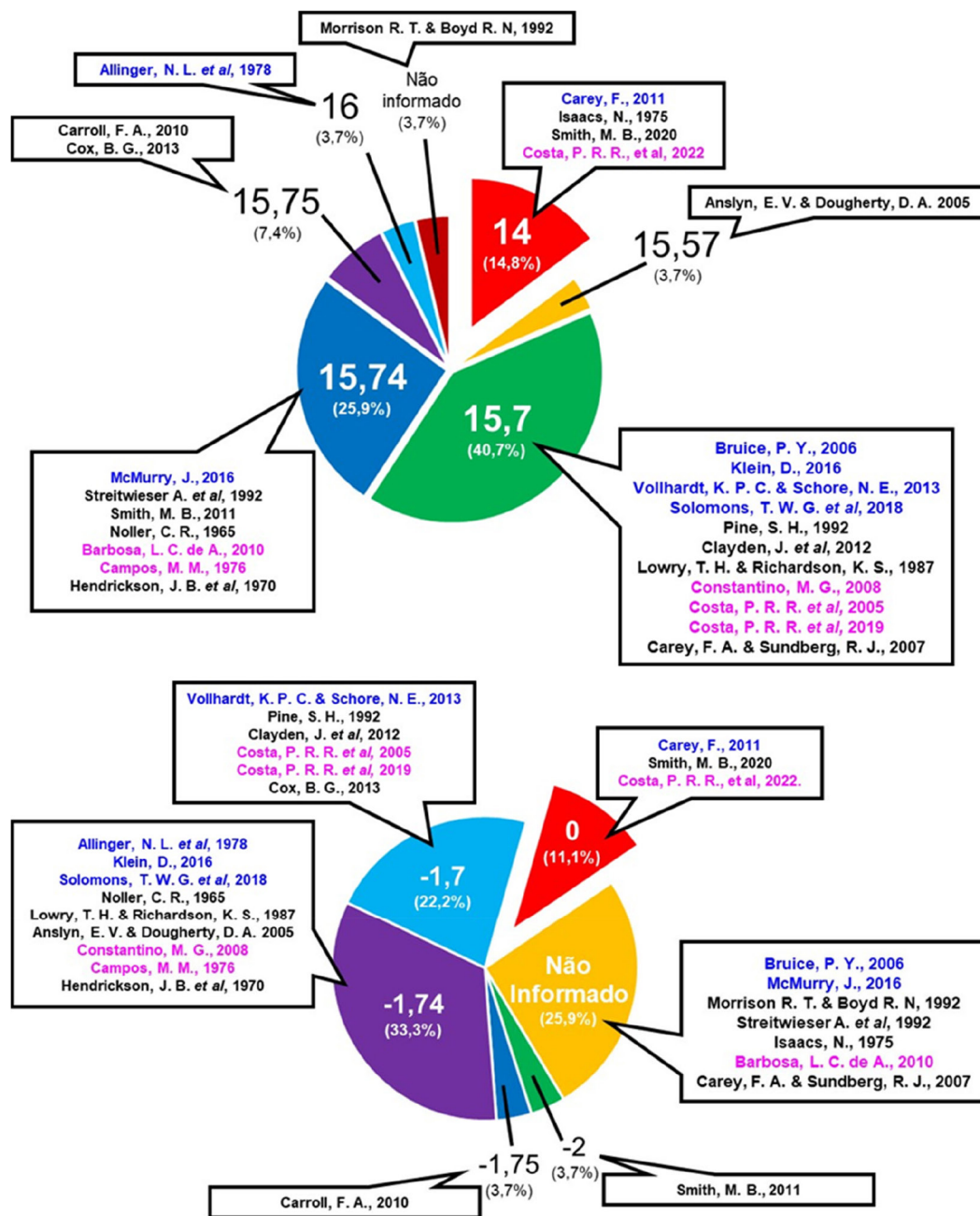
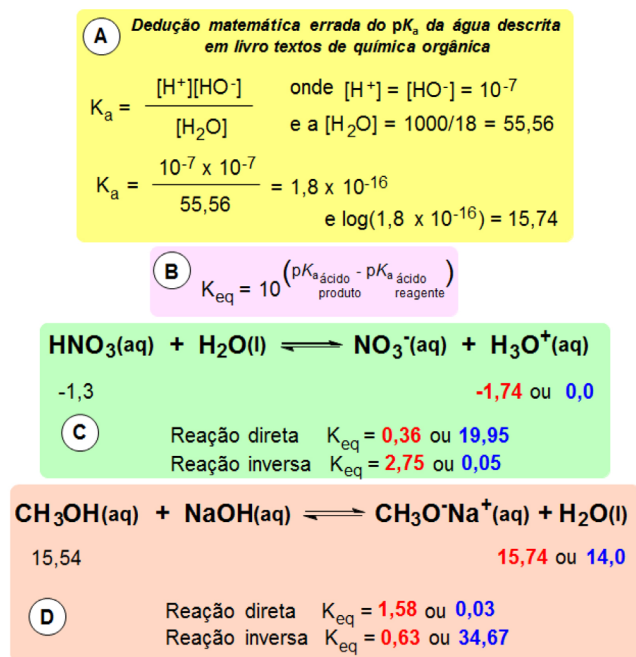


Figura 3. Valores de  $pK_a$ , da água (acima) e do cátion hidrônio (abaixo) nos livros de química orgânica traduzidos do inglês (azul) e empregados no Brasil, não traduzidos e empregados em cursos básicos ou avançados (preto), e nos escritos por pesquisadores no Brasil (rosa)<sup>14-42</sup>

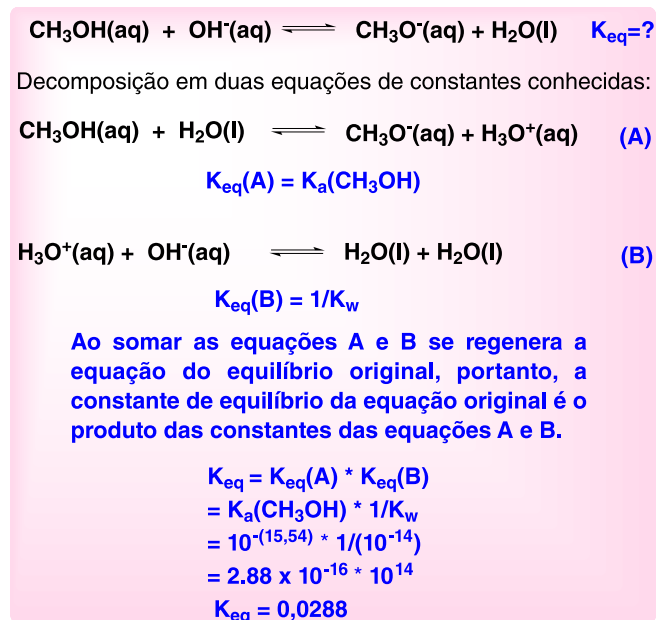
da realidade experimental, uma situação inapropriada para o ensino de química, uma vez que a simbiose fato reforçando teoria/teoria explicando fato é uma premissa pedagógica que, de acordo com Kuhn,<sup>1</sup> contempla a “natureza da educação científica. A esta altura deveria estar claro que os cientistas nunca aprendem conceitos, leis e teorias de forma abstrata e isoladamente. Em lugar disso, esses instrumentos intelectuais são, desde o início, encontrados numa unidade histórica e pedagogicamente anterior, onde são apresentados juntamente com suas aplicações e através delas. Depois de aceitas, essas aplicações (ou mesmo outras) acompanharam a teoria nos manuais onde futuros cientistas aprenderão seu ofício. As aplicações não estão lá simplesmente como um adorno ou mesmo como documentação. Ao contrário, o processo de aprendizado de uma teoria depende do estudo de suas aplicações, incluindo-se aí a prática na resolução de problemas, seja com lápis e papel, seja com instrumentos num laboratório.”

Os artigos científicos que foram apontados como origem do erro estão discutidos nos trabalhos recentes.<sup>2,3</sup> Quanto a origem da propagação do erro nos livros de química orgânica, Silverstein sugere a monografia de Donald James Cram (prêmio Nobel de Química de 1987), *Fundamentals of Carbanion Chemistry*, de 1965,<sup>43</sup> que contagiou a 3ª edição (1970) do livro *Organic Chemistry* de autoria de Hendrickson, Cram e Hammond,<sup>28</sup> que foi muito popular até o final do século 20, e muito mais dedicado ao ensino geral de química orgânica que o primeiro livro de Cram. A influência do *March's Advanced Organic Chemistry* na disseminação do erro também é apontada pois, desde a 1ª edição (1968)<sup>32</sup> até a 7ª (2013),<sup>37</sup> são indicados os valores errados, só sendo corrigidos na 8ª edição (2020).<sup>38</sup>

Contudo, entendemos que é muito importante levar em consideração a influência de Carl Robert Noller<sup>35</sup> no cenário geral. Ele foi professor da Universidade de Stanford, e seu mais importante livro *Chemistry of Organic Compounds* foi publicado em 1951



**Figura 4.** (a) Dedução errada do  $pK_a$  da água; (b) equação para o cálculo de  $K_{eq}$  empregando valores de  $pK_a$ ; (c) e (d) exemplos de conclusões desconectadas da realidade experimental quando são empregados os valores errados do  $pK_a$  da água e do cátion hidrônio encontrados nos livros de química orgânica, em comparação aos valores corretos do  $pK_a$



**Figura 5.** Dedução da constante de equilíbrio pelo método termodinâmico para a reação que representa o comportamento de metanol com hidróxidos dos metais alcalinos

(885 páginas) e teve três edições, a última em 1965 (1115 páginas), ensinando assuntos extremamente modernos para a época, o que justifica o incremento de número de páginas. Foi um livro muito influente, sendo adotado como livro texto em diversas universidades dos Estados Unidos.<sup>44-46</sup> Alcançou fama mundial e foi traduzido para o alemão, chinês e espanhol, entre outras línguas, mas não foi traduzido para o português. Contudo, há registros do uso da terceira edição em cursos no Instituto de Química da USP. Um dos autores do presente artigo (S. C.) herdou, de professores aposentados do Departamento

de Química Orgânica do Instituto de Química da UFBA, a primeira e a terceira edições, cujas aquisições são datadas de 1954 e 1971, respectivamente, o que sugere a familiaridade da comunidade de professores brasileiros de química orgânica com esse livro.

Apenas na 3ª edição (1965) é que se encontram os valores do  $pK_a$  da água e do cátion hidrônio, e no prefácio há a informação que o capítulo “Chemical Reactivity”, que apresenta esses dados, não existia nas edições anteriores, nas quais não encontramos informações sobre valores de  $pK_a$ .

Apesar do ano de publicação do primeiro livro de Cram<sup>43</sup> ser o mesmo da 3ª edição do Noller,<sup>35</sup> a monografia de Cram teve apenas uma edição e é destinada a um público especializado e de circulação mais restrita (e cita apenas a constante  $pK_a(H_2O)$  15,7 sem fazer menção ao hidrônio), enquanto o livro do Noller é um livro deliberadamente concebido para ser um livro de formação geral de química orgânica (que cita os dois valores errados das constantes  $pK_a(H_2O)$  15,74/  $pK_a(H_3O^+)$  -1,74), cujo sucesso editorial mundial é bem conhecido. A influência do livro do Noller é significativamente maior e deve ter impactado na concepção dos livros destinados ao ensino geral de química orgânica, concebidos posteriormente nos Estados Unidos, inclusive do próprio livro *Organic Chemistry* de Hendrickson, Cram e Hammond. Contudo, face a popularidade alcançada por este último livro,<sup>47</sup> não se pode subestimar a sua contribuição na propagação do erro. Neste caso, ser o livro pioneiro é menos importante, pois o prestígio e alcance dos dois livros contribuíram para a popularização dos valores e propagação do erro.

No Brasil, os livros americanos traduzidos são a fonte majoritária dos livros para o ensino da química orgânica, e a origem na propagação do erro parece se iniciar nas traduções. A correção do erro poderia ter sido executada pelo tradutor, desde que detectasse o erro através de uma tradução crítica. Todavia, como todos os químicos orgânicos atuando no Brasil, desde 1965, foram educados estudando em algum desses livros de química orgânica originalmente escrito em língua inglesa (mesmo que traduzido para o português), ou em livros em português escritos por pesquisadores atuando no Brasil que foram formados estudando nos livros mencionados, os tradutores e os autores dos livros em português deveriam estar convertidos aos valores errados. Ou seja, com as raras exceções apontadas na Figura 3, estamos ainda no círculo vicioso do erro. Este artigo intenciona contribuir para mudar este cenário.

## CONCLUSÕES

Os valores  $pK_a(H_2O) = 15,74$  e  $pK_a(H_3O^+) = -1,74$  presentes nos livros textos de química orgânica atualmente empregados no Brasil são inadequados e o emprego destes valores leva a conclusões desconectadas da realidade experimental, pois são 55 vezes diferentes dos valores corretos da acidez. Os valores  $pK_a(H_2O) = 14,0$  e  $pK_a(H_3O^+) = 0,0$  devem ser ensinados na graduação e na pós-graduação. Uma coleção interessante de tabelas com valores de  $pK_a$  já corrigidos pode ser encontrada na Divisão de Química Orgânica da ACS.<sup>48</sup>

A necessidade de os livros de química orgânica atuais corrigirem o erro deriva da função pedagógica que estes manuais exercem, pois, “os conhecimentos científicos dos profissionais, bem como os dos leigos, estão baseados nos manuais e em alguns outros tipos de literatura deles derivada. Entretanto, sendo os manuais veículos pedagógicos destinados a perpetuar a ciência normal, devem ser parcial ou totalmente reescritos toda vez que a linguagem, a estrutura dos problemas ou as normas se modifiquem.”<sup>1</sup>

## MATERIAL SUPLEMENTAR

A Tabela 1S contendo a relação dos livros consultados com a

indicação da página onde a valor do  $pK_a$  está descrito está disponível em <http://quimicanova.sbq.org.br>, na forma de arquivo PDF, com acesso livre.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o suporte financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia – FAPESB e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Agradecemos as bolsas de pós-graduação do CNPq para L. A. e a bolsa de produtividade em pesquisa de S. C.

## REFERÊNCIAS

1. Kuhn, T. S.; *A Estrutura das Revoluções Científica*, 1ª ed.; Editora Perspectivas: São Paulo, 2001, p. 71, 174 e 175.
2. Silverstein, T. P.; Heller, S. T.; *J. Chem. Educ.* **2017**, *94*, 690. [Crossref]
3. Neils, T. L.; Silverstein, T. P.; Schaertel, S.; *J. Chem. Educ.* **2023**, *100*, 1676. [Crossref]
4. <https://www.youtube.com/watch?v=u5Nyzs3CSc8&t=12s>, acessada em julho 2023.
5. Brown, T. L.; Lemay Junior, H. E.; Bursten, B. E.; Burdge, J. R.; *Química - A Ciência Central*, 9ª ed.; Pearson Education do Brasil: São Paulo, 2005.
6. Kotz, J. C.; Treichel, P. M.; Townsend, J. R.; Treichel, D. A.; *Química Geral e Reações Químicas*, 3ª ed.; Cengage Learning: São Paulo, 2016.
7. Atkins, P. W.; Jones, L.; Laverman, L.; *Princípios de Química - Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente*, 7ª ed.; Bookman: Porto Alegre, 2018.
8. Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G.; *Inorganic Chemistry*, 2ª ed.; Pearson Prentice Hall: London, 2005.
9. Atkins, P. W.; de Paula, J.; *Physical Chemistry*, 9ª ed.; Oxford University Press: New Jersey, 2010.
10. Hawkes, S. J.; *J. Chem. Educ.* **1995**, *72*, 799. [Crossref]
11. Gama, M. S.; Afonso, J. C.; *Quim. Nova* **2007**, *30*, 232. [Crossref]
12. dos Santos, R. L.; de Queirós, W. P.; Damasceno, F. C.; Batista, L. N.; *Quim. Nova* **2023**, *46*, 755. [Crossref]
13. Freire, P.; *A Importância do Ato de Ler*, 51ª ed.; Cortez: São Paulo, 1981, p.12 e 24.
14. Allinger, N. L.; Cava, M. P.; de Jongh, D. C.; Johnson, C. R.; Lebel, N. A.; Stevens, C. L.; *Química Orgânica*, 2ª ed.; Guanabara Dois: Rio de Janeiro, 1978.
15. Anslyn, E. V.; Dougherty, D. A.; *Modern Physical Organic Chemistry*, Illustrated ed.; University Science Books: New York, 2005.
16. Barbosa, L. C. A.; *Introdução à Química Orgânica*, 1ª ed.; Pearson: São Paulo, 2011.
17. Bruice, P. Y.; *Química Orgânica*, vol. 2, 4ª ed.; Prentice Hall: São Paulo, 2006.
18. Campos, M. M.; *Química Orgânica*, vol. 1, 1ª ed.; Edgard Blücher: São Paulo, 1976.
19. Carey, F. A.; *Química Orgânica*, vol. 1, 7ª ed.; McGraw-Hill-Bookmann: São Paulo, 2011.
20. Carey, F. A.; Sundberg, R. J.; *Advanced Organic Chemistry Part A: Structure and Mechanisms*, 5ª ed.; Springer: New York, 2007.
21. Carroll, F. A.; *Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry*, 2ª ed.; Wiley: New Jersey, 2010.
22. Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; *Organic Chemistry*, 2ª ed.; Oxford University Press: Oxford, 2012.
23. Constantino, M. G.; *Química Orgânica: Curso Básico Universitário*, vol. 1, 1ª ed.; LTC: Rio de Janeiro, 2008.
24. Costa, P. R. R.; Ferreira, V. F.; Esteves, P. M.; Vasconcellos, M.; *Ácidos e Bases em Química Orgânica*, 1ª ed.; Bookman: Porto Alegre, 2005.
25. Costa, P. R. R.; Pinheiro, S.; Pilli, R. A.; Bakuzis, P.; *The Chemistry of Carbonyl Compounds and Derivatives*, 2ª ed.; Royal Society of Chemistry: London, 2022.
26. Costa, P. R. R.; Pinheiro, S.; Pilli, R. A.; *Substâncias Carboniladas e Derivados*, 2ª ed.; EditSBQ: São Paulo, 2019.
27. Cox, B. G.; *Acids and Bases: Solvent Effects on Acid-Base Strength*, Illustrated ed.; Oxford University Press: Oxford, 2013.
28. Hendrickson, J. B.; Cram, D. J.; Hammond, G. S.; *Organic Chemistry*, 3ª ed.; McGraw-Hill: New York, 1970.
29. Isaacs, N. S.; *Physical Organic Chemistry*, 2ª ed.; Wiley-Blackwell: New Jersey, 1975.
30. Klein, D.; *Química Orgânica*, vol. 1, 2ª ed.; LTC: Rio de Janeiro, 2016.
31. Lowry, T. H.; Richardson, K. S.; *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*, 3ª ed.; Harper & Row: New York, 1987.
32. March, J.; *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure*, 1ª ed.; McGraw-Hill: New York, 1968.
33. McMurry, J.; *Química Orgânica*, 3ª ed.; Cengage Learning: São Paulo, 2016.
34. Morrison, R. T.; Boyd, R. N.; *Organic Chemistry*, 6ª ed.; Prentice Hall International, Inc.: New Jersey, 1992.
35. Noller, C. R.; *Chemistry of Organic Compounds*, 3ª ed.; W. B. Saunders Company: Philadelphia, 1965.
36. Pine, S. H.; *Organic Chemistry*, 5ª ed.; McGraw-Hill International: Singapore, 1987.
37. Smith, M. B.; *March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure*, 7ª ed.; Wiley: New Jersey, 2013.
38. Smith, M. B.; *March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure*, 8ª ed.; Wiley: New Jersey, 2020.
39. Smith, M. B.; *Organic Chemistry: An Acid-Base Approach*, 1ª ed.; CRC Press: Boca Raton, 2011.
40. Solomons, T. W. G.; Fryhle, C. B.; Snyder, S. A.; *Química Orgânica*, vol. 1, 12ª ed.; LTC: Rio de Janeiro, 2018.
41. Streitwieser, A.; Heathcock, C. H.; Kosover, E. M.; *Introduction to Organic Chemistry*, 4ª ed.; Macmillan Publishing Company: New York, 1992.
42. Vollhardt, K. P. C.; Schore, N. E.; *Química Orgânica: Estrutura e Função*, 6ª ed.; Bookman: Porto Alegre, 2013.
43. Cram, D. J.; *Fundamentals of Carbanion Chemistry*, 1ª ed.; Academic Press: New York, 1965.
44. Nelson, B. A.; *J. Chem. Educ.* **1967**, *44*, 181. [Crossref]
45. <https://chemistry.stanford.edu/people/carl-robert-noller>, acessada em julho 2023.
46. <https://www.orgsyn.org/content/pdfs/bios/noller.pdf>, acessada em julho 2023.
47. Bowman, B. G.; Karty, J. M.; Gooch, G.; *J. Chem. Educ.* **2007**, *84*, 1209. [Link] acessado em julho 2023
48. <https://organicchemistrydata.org/hansreich/resources/pka/>, acessada em julho 2023.

