

O MUNDO DAS MOLÉCULAS DE ÁGUA

A água é uma substância tão comum na Terra que muitas vezes não nos apercebemos da sua natureza única. Trata-se de um composto molecular cujas propriedades continuam a desafiar físicos e químicos. O seu estudo é importante em áreas como a nucleação em fase gasosa, fenómenos de catálise, a física e a química da atmosfera e o comportamento de soluções aquosas em Biologia e Química. É necessário, em qualquer um dos casos, que o comportamento da água seja bem compreendido ao nível molecular. Compreender os mecanismos que presidem às mudanças de estado, estudar o comportamento de agregados de água e descobrir e prever novas estruturas (como o gelo XII, que existe a altas pressões e a temperaturas Celsius negativas) são desafios que têm motivado intensa investigação. Simulações moleculares, mais simples ou mais sofisticadas, são essenciais nessa compreensão.

Por exemplo, o programa *Água Virtual*, foi desenvolvido no Centro de Física Computacional do Departamento de Física da Universidade de Coimbra, com o objectivo de ajudar estudantes a compreender as fases e transições de fase da água (Fig. 1). Neste programa é possível visualizar, por exemplo, na fase líquida, as estruturas tridimensionais de alguns agregados de moléculas (dímero, trímero e hexâmero, com, respectivamente, duas, três e seis moléculas) e, na fase sólida, estudar, para além da estrutura normal do gelo (Fig. 2), a estrutura do gelo XII (Fig. 3).

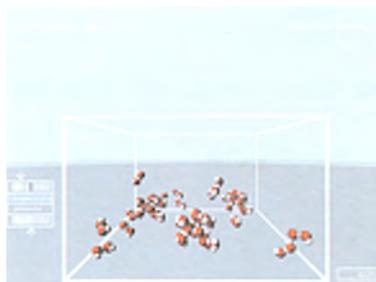


Fig. 1. A transição líquido – sólido no programa *Água Virtual*. Os comportamentos mais relevantes são a contínua perda de velocidade dos agregados moleculares e a formação de novas ligações de modo a emergir a estrutura do gelo.

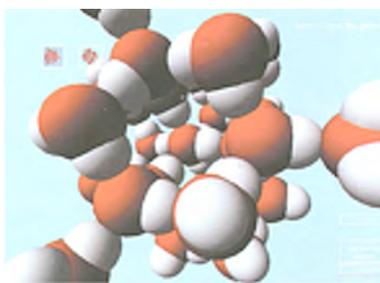


Fig. 2. A estrutura do gelo normal no programa *Água Virtual*.

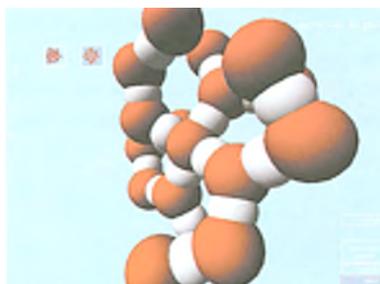


Fig. 3. A estrutura do gelo XII, uma estrutura tetragonal que existe na faixa de pressões de 0,2 GPa a 0,6 GPa ($16\text{Pa} = 10^9$ pascal) e na gama de temperaturas de -100°C a 0°C .

A molécula de água é composta por um átomo de oxigénio e dois átomos de hidrogénio (Fig. 4). Mede cerca de 0,1 nanómetros, sendo 1 nanómetro = 10^9 m. Esta constituição molecular, apesar de simples, conduz a comportamentos complexos da água. Por exemplo, a sua fase líquida possui algumas propriedades invulgares que a distinguem de um qualquer outro líquido.

Algumas dessas propriedades (por exemplo, maior densidade na fase líquida do que na sólida – por isso é que o gelo flutua, altas temperaturas de fusão e evaporação, elevado valor da sua capacidade térmica, valor máximo da sua densidade a 4°C , etc.) advêm das ligações por pontes de hidrogénio.

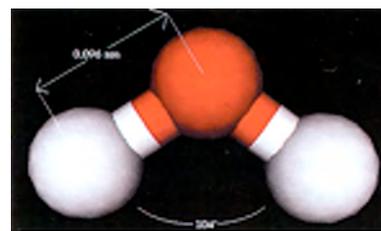


Fig. 4. Modelo da molécula de água. A vermelho está representado o átomo de oxigénio e a cinzento os dois átomos de hidrogénio. A distância entre os átomos de oxigénio e de hidrogénio é de 0,096 nm e o ângulo de ligação é de 104° .

As ligações por pontes de hidrogénio ocorrem quando um átomo de hidrogénio de uma molécula de água se liga ao átomo de oxigénio de uma outra molécula de água (Fig. 5). Trata-se de uma atracção dipolo-dipolo entre o hidrogénio e o oxigénio.

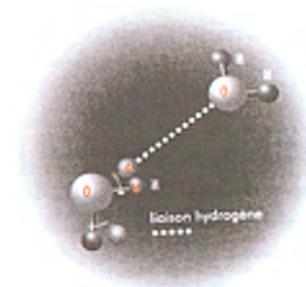


Fig. 5. Esquema de uma ligação por ponte de hidrogénio. A carga positiva do núcleo de um átomo de hidrogénio de uma molécula de água é atraído pela carga negativa da nuvem electrónica de um átomo de oxigénio vizinho. Estabelece-se então uma ligação de hidrogénio entre as duas moléculas: o átomo de hidrogénio alinha-se com os átomos de oxigénio das duas moléculas (a). Se, por rotação molecular, o átomo de hidrogénio de uma ligação for desalinhado do eixo formado pelos átomos de oxigénio, a ligação rompe-se (b) [1]

Esta ligação é dominante no comportamento da água líquida (na qual as moléculas estão, em média, separadas por 0,19 nm). As ligações por pontes de hidrogénio formam-se e quebram-se milhares de vezes por segundo.

Na fase sólida (gelo), as ligações por pontes de hidrogénio são responsáveis pelo arranjo das moléculas de água numa malha tetraédrica, que se repete em toda a estrutura cristalina (Fig. 6). A distância entre os átomos de oxigénio nesta estrutura é de aproximadamente 0,28 nm. Mesmo depois do gelo fundir continuam a existir 90% das ligações por pontes de hidrogénio que existiam na fase sólida

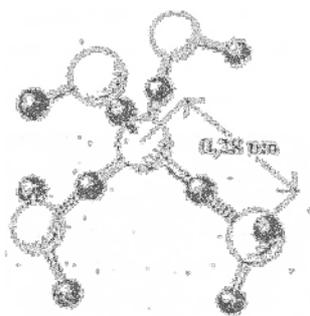


Fig.6. Estrutura tetraédrica do gelo cristalino. Cada molécula de água está rodeada de quatro outras. A ligação entre as moléculas é feita por pontes de hidrogénio. A distância entre os átomos de oxigénio (representados a branco) é de 0,28 nm [2].

Na fase gasosa (vapor de água) estas ligações são quase inexistentes devido à elevada energia cinética das moléculas. A pressão constante, o aquecimento da água líquida leva a um aumento da energia de vibração das moléculas de água, que conduz a uma quebra das ligações por pontes de hidrogénio. As moléculas ficam quase todas livres e afastadas por distâncias superiores a 0,2 nm.

JORGE TRINDADE

Escola Superior de Tecnologia e Gestão do Instituto Politécnico da Guarda
jtrindade@ipg.pt

CARLOS FIOLHAIS

Departamento de Física e Centro de Física Computacional da Universidade de Coimbra
3004-516 Coimbra

AGRADECIMENTOS

Agradecemos a colaboração do Dr. José Carlos Teixeira e do Dr. Victor Gil no Projecto Água Virtual.

BIBLIOGRAFIA

- [1] José Teixeira, L'eau, liquide ou cristal déliquescents?, *La Recherche*, **324**, Outubro, 1999.
- [2] S. Sugano e H. Koizumi, "Microcluster Physics", Springer, 1998.

ESCALAS DO TEMPO

As escalas de espaço permitem-nos compreender e integrar distâncias. Traçamos caminhos e planeamos viagens. Podemos mesmo fazê-lo em distâncias muito para cá do que vemos, por exemplo dentro de nós próprios, ou muito para além do que jamais conseguiríamos percorrer. Mesmo à velocidade da luz, seria impossível viajarmos até ao outro lado da nossa Galáxia, porque a distância é grande de mais em relação ao tempo da nossa vida. Aqui podemos mesmo dizer: não temos tempo.

Cada um de nós conhece bastante mais do que poderia descobrir só por si, porque é privilégio da nossa espécie transmitir as memórias e os conhecimentos que se acumularam com o desenrolar do tempo. Tudo começou há tanto tempo que, tal como para o espaço, precisamos de escalas para compreender o passado.

Que unidade usar? Se perguntássemos a idade a um jovem e ele nos respondesse 536 457 600 segundos, a resposta estaria porventura correcta. Mas faz muito mais sentido que a resposta seja: 17 anos. Por isso, ninguém se importará se for utilizada uma unidade que não pertence ao Sistema Internacional - o ano.

No final de 2002 vamos assistir aos habituais balanços do ano que agora come-

çou, do ponto de vista político, económico e social. Na perspectiva pessoal, entre as várias recordações poderá estar a visita à exposição *Potências de 10, o mundo às várias escalas*, incluindo provavelmente um passeio no jardim da Fundação Gulbenkian. Esta e todas as recordações de 2002 referem-se ao tempo presente - 10^0 anos.

Se começarmos agora a recuar no tempo, ao longo das várias potências de dez, as recordações são mais difusas logo no primeiro passo, dezenas de anos - 10^1 anos. Já poucos se lembram da construção da sede da Fundação (Fig. 1), ou do modo como o respectivo espaço antes estava ocupado. Acontecimentos tão recentes, como a introdução do cartão multibanco (1985), o 25 de Abril de 1974 ou as primeiras emissões de televisão em Portugal (1956) assumem um carácter histórico, sobretudo para as pessoas que nasceram depois.

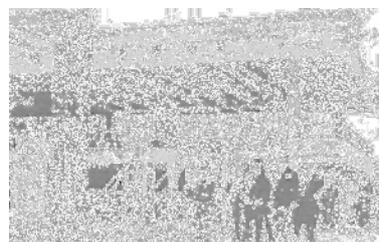


Fig.1. Construção da sede da Fundação Gulbenkian junto à Praça de Espanha, Lisboa, em 1965; anteriormente funcionava aqui a Feira Popular (cortesia da Fundação Calouste Gulbenkian).

As centenas de anos - 10^2 anos - incluem toda a História de Portugal. Muitos acontecimentos importantes foram construindo a nossa História, mas um dos mais marcantes foi sem dúvida o sismo de 1755. Um fenómeno natural, inerente à dinâmica interna do planeta, que se fez sentir com grande intensidade e magnitude em quase todo o País. A destruição e a perda de vidas impressionaram profundamente o resto da Europa. Philippe Le Bas, gravador régio em Paris, fez gravuras fiéis a partir de esboços feitos no local. Vários autores escreveram sobre esta tragédia, entre os quais os próprios Voltaire e Kant.