



Introdução à Estrutura da Matéria

Temos contato no dia-a-dia com a observação de fenômenos de natureza macroscópica. A nossa compreensão da estrutura da matéria é usualmente apoiada no comportamento macroscópico de materiais e substâncias em geral. Contudo, para compreendermos mais profundamente as propriedades da matéria, temos de investigá-la sob um ponto de vista microscópico, isto é, em nível eletrônico ou, como costumamos dizer, no “nível molecular”. A mecânica clássica Newtoniana não é capaz de descrever o comportamento de sistemas como átomos e moléculas. Precisamos de uma nova teoria para estudar o comportamento de partículas muito pequenas. Esta nova teoria, denominada mecânica quântica, fornece a base de sustentação necessária para estudarmos o comportamento da matéria através da análise das propriedades dos átomos e moléculas que a constituem. Para tentarmos compreendê-la, vale esta reflexão sobre a prática do pensamento científico:

Qualquer teoria nova somente se tornará geralmente aceita pela comunidade científica se esta for apta não somente a explicar as observações já feitas pelos cientistas mas também prever os resultados de novos experimentos ainda não realizados. Este teste rigoroso de idéias científicas novas é o fator chave para distinguir ciência de outras áreas de aspiração intelectual, tal como história de eventos econômicos ou mesmo pseudo-ciência, como astrologia (Hey and Walters, p. 1, 1994).

Um outro aspecto de discussão comum é sobre a necessidade de uma nova teoria como a mecânica quântica. O texto abaixo fornece sem dúvida subsídios para uma boa discussão:

Como nós podemos convencê-lo que a mecânica quântica é necessária

e útil? Bem, um físico, exatamente como um bom detetive, executa uma análise minuciosa das evidências e lembra a grande máxima de Sherlock Holmes: “Quando você tiver excluído o impossível, o que quer que reste, por mais improvável, deve ser a verdade”. Não obstante, não foi sem muita relutância que os físicos do século XX se convenceram de que o completo magnífico edifício da física clássica não estava ‘quase totalmente correto’ para descrever o comportamento de átomos, mas tinha, em vez disso, que ser radicalmente reconstruído. Em nenhum outro lugar esta confusão foi gerada de forma mais evidente e dolorosa do que nas tentativas de compreender a natureza da luz” (Hey and Walters, p. 3, 1994).

Nesta edição de *Química Nova na Escola* mostraremos os novos conceitos que surgiram com o advento da química quântica e suas implicações para a “visão do universo em que vivemos”. Nesta nova abordagem relacionaremos as propriedades microscópicas com aquelas que percebemos no mundo macroscópico, explicando fenômenos que não são possíveis de serem explicados pela mecânica clássica. Muitas áreas atualmente se beneficiam dos estudos da química quântica. Áreas como eletrônica, materiais, química fina, química farmacêutica, medicina e a própria pesquisa científica, seja ela acadêmica ou tecnológica, utilizam largamente os conceitos da química quântica para interpretar seus resultados experimentais, para preverem comportamentos e, mais recentemente, para planejarem experimentos e sínteses de novas substâncias.

Destacamos, nos próximos capítulos, alguns dos aspectos e conceitos mais importantes da química quântica, buscando trazer para o nosso dia-a-dia

esta nova realidade. No capítulo I, discutimos brevemente o principal objeto da química: a molécula. Mostramos como ela pode ser modelada a partir de conceitos clássicos, sem levar em conta explicitamente os elétrons! Em seguida, no capítulo II, mergulhamos no mundo quântico, apresentando alguns dos experimentos que desafiaram os cientistas do início do século XX. Os fundamentos da química quântica são apresentados, procurando minimizar o emprego do formalismo matemático.

A natureza da ligação química é discutida em profundidade no capítulo III E para tanto, lançamos mão da química quântica na interpretação de fenômenos espectroscópicos. Ligação covalente, ligação iônica e ligação metálica são aspectos diferentes de um mesmo fenômeno: ligação química. As propriedades periódicas são discutidas brevemente. As teorias mais aceitas para descrever a estrutura eletrônica das moléculas são novamente apresentadas minimizando a aproximação matemática, mas evidenciando sempre as definições e conceitos. As tendências na pesquisa em química teórica são brevemente apresentadas. Atualmente há vários experimentos espectroscópicos, e surgem novos a cada dia! No capítulo IV, apresentamos com mais detalhe a espectroscopia molecular. Esta é uma das mais antigas e mais usadas técnicas para a identificação de compostos.

Finalmente, no capítulo V, discutimos as interações entre as moléculas. São estas interações intermoleculares responsáveis pelas propriedades físicas das substâncias, tais como pontos de fusão e ebulição, estado físico, estrutura cristalina de sólidos moleculares etc. Acreditamos que estes cinco capítulos, em conjunto, são um convite a entrar no maravilhoso mundo da química, conhecendo a intimidade da estrutura da matéria, quebrando paradigmas e abrindo a nossa visão rumo ao futuro.

Wagner B. de Almeida, doutor em química pela Universidade de Manchester, é professor adjunto no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

Referências bibliográficas

Hey, T. and Walters, P. *The quantum universe*, Cambridge: Cambridge University Press, 1994.