

A seção “Conceitos científicos em destaque” engloba artigos que abordam de forma nova e/ou crítica conceitos químicos ou de interesse direto dos químicos.

Neste número dedicado ao centenário da descoberta do elétron, vamos discutir o significado de se atribuir fórmulas às substâncias – tomando como exemplo a água —, procurando apontar as possibilidades e limites dos modelos de estrutura molecular.

► fórmulas químicas, água, ligações químicas ◀

A descoberta do elétron abriu imensas possibilidades para a química. E provocou, de imediato, especulações sobre a estrutura do átomo, problema que levaria algumas décadas para ser resolvido. Um modelo adequado para a estrutura atômica resultou na possibilidade de se tratar a estrutura molecular como imagem de um objeto real. As fórmulas, que antes representavam simplesmente a proporção com que os elementos se combinavam para formar a substância, passaram a ser objeto de investigação por métodos espectroscópicos. A elucidação de estruturas moleculares passou a ser uma rotina na investigação química. O que significa, porém, dizer que uma substância tem esta ou aquela estrutura molecular?

Dizemos que a fórmula da água é H_2O . Às vezes, quando a representa-

mos dessa maneira — simplesmente por duas letras e um número —, temos a sensação de nos apropriarmos da própria essência da água.

A água, como solvente universal, viabiliza a vida no planeta. É a única substância que, nas condições físico-químicas da Terra, apresenta-se nos três estados da matéria. O gelo tem a notável propriedade de ser um sólido menos denso que seu correspondente líquido: a maioria dos sólidos afunda em seus líquidos. O gelo flutua na água, e isso é fundamental para a vida no planeta, pois nas regiões frias os mares congelam apenas na superfície, preservando seu caldeirão de vida.

A água é evidentemente muito mais que um simples solvente universal. Quando matamos nossa sede ou nos banhamos nas águas límpidas de um riacho, “ela representa a soma dos olhos de toda a humanidade, porque no seu circular contínuo pelo ambiente já viveu a experiência de todas as lágrimas, desceu por todas as gargantas, visitou geleiras, montanhas, rios e oceanos e vem transitando pelos nossos corpos desde a aurora do planeta”¹.

Mesmo do ponto de vista científico, vale a pena discutir qual o significado de atribuímos uma fórmula simples a uma substância tão maravilhosa como a água. Quando Lavoisier anunciou à Academia de Ciências de Paris, em 1783, que a água era composta por hidrogênio e oxigênio, estava propondo uma maneira de definir um elemento químico completamente diferente da visão aristotélica: um elemento poderia ser definido experimentalmente como qualquer

o significado das fórmulas QUÍMICAS

Eduardo Fleury Mortimer

substância que não pudesse ser decomposta por métodos químicos. Quando John Dalton propôs a teoria atômica em 1803, sugeriu a interpretação de que cada elemento fosse constituído por uma única espécie de átomos. Em uma reação química, os átomos de diferentes elementos poderiam combinar-se para formar moléculas (chamadas por Dalton de ‘átomos compostos’), que seriam a menor unidade da substância composta. Para Dalton, um átomo de hidrogênio combinava-se com um átomo de oxigênio para formar a molécula de água — que teria a fórmula HO. Gay-Lussac, seguindo os trabalhos de Cavendish e Priestley, verificou que na formação da água dois volumes de hidrogênio combinam-se com um volume de oxigênio. Logo após a publicação desses resultados por Gay-Lussac, em 1808, Berzelius sugeriu a fórmula H_2O para a água. A idéia de fórmula química surgiu, portanto, como uma forma de expressar as quantidades das substâncias elementares que se combinam.

A idéia de fórmula química sugiu como uma forma de expressar as quantidades das substâncias elementares que se combinam

A partir da segunda metade do século XIX, os químicos começaram a usar as fórmulas como uma representação espacial da molécula, que poderia explicar várias propriedades das substâncias.

As fórmulas químicas passavam a representar não só as quantidades combinadas mas também a realidade molecular, permitindo antever como os átomos que constituíam a molécula estavam distribuídos no espaço e de que forma se ligavam uns aos outros. É interessante observar que, durante a segun-

da metade do século XIX, o esforço criativo de químicos como Kekulé, Le Bell, Van't Hoff etc. permitiu que se passasse a 'enxergar' a realidade molecular, a despeito de não haver nenhuma evidência direta de que essa realidade realmente existisse. A imaginação criativa desses cientistas permitia que deduzissem essas fórmulas a partir do estudo das propriedades das substâncias. Pode ser mais que uma feliz coincidência, por exemplo, o fato de Kekulé ter sido arquiteto: assim como os arquitetos constroem seus edifícios na imaginação e no papel antes que estes tomem forma na realidade, os químicos de então foram capazes de prever estruturas químicas que só se tornaram observáveis muitos anos mais tarde.

Durante a segunda metade do século XIX, o esforço criativo de químicos permitiu que se passasse a 'enxergar' a realidade molecular a despeito de não haver nenhuma evidência direta de que essa realidade realmente existisse

A teoria quântica, aplicada à química a partir da década de 30 de nosso século, introduz um significado mais preciso à idéia de valência que fora usada para explicar o poder de combinação dos elementos. O átomo é representado como sendo constituído por duas regiões de cargas diferentes. O núcleo, situado numa região infinitamente pequena no centro do átomo, tem carga positiva, pois é constituído por prótons (de carga positiva) e nêutrons (de carga neutra). Ao redor desse núcleo situam-se os elétrons (de carga negativa), numa região cerca de 100 000 vezes maior que o núcleo, denominada eletrosfera. A ligação química passa a representar um interação de natureza eletromagnética que ocorre entre os núcleos (carregados positivamente) e as eletrosferas (carregadas negativamente) de átomos vizinhos. O 'tracinho' com que ligamos os átomos de hidrogênio e oxigênio na fórmula da água representa na verdade uma região do espaço ocupada por elétrons que estão sendo atraídos pelos dois núcleos vizinhos (o do oxigênio e o do hidrogênio). Ele não tem a realidade física de um elo material, apenas representa uma interação ou força elétrica que tem uma direção preferencial. Uma

outra forma de representar essa ligação seria uma nuvem eletrônica. Compare as duas representações na Fig. 1. O fato de a primeira representação ser mais usual está ligado a sua simplicidade. No entanto, do ponto de vista de uma maior aproximação da natureza da ligação química, a segunda representação é mais conveniente.

Uma das propriedades fundamentais da água é o fato de ela ser um solvente muito melhor que a maioria dos líquidos comuns. Essa propriedade está relacionada à polaridade da molécula de água, explicável pela existência de um ângulo de $104,5^\circ$ entre as ligações O-H. Como os átomos de oxigênio atraem os elétrons da ligação mais intensamente, aparece uma carga parcial positiva

nos átomos de hidrogênio e uma carga parcial negativa no átomo de oxigênio. Se a molécula de água fosse linear — com um ângulo de 180° entre as ligações O-H, a polaridade de uma ligação anularia a da outra, e a molécula seria apolar. É o que acontece, por exemplo, no gás carbônico, CO_2 .

Sendo polares, as moléculas de água podem hidratar íons e outras moléculas polares. No processo de solvatação, representado na Fig. 2, íons positivos e negativos ficam envoltos por moléculas de água, orientadas de maneira diferente em cada caso. Enquanto para os íons positivos é a região negativa da molécula de água (próxima do átomo de oxigênio) que envolve os íons, para os íons negativos é a região positiva (próxima dos átomos de hidrogênio) que desempenha esse papel.

A forte polaridade da molécula de água faz com que apareça um tipo de ligação especial entre as moléculas de água chamada ligação de hidrogênio, formada quando os átomos de oxigê-

nio de uma molécula atraem os átomos de hidrogênio da molécula vizinha. Na Fig. 1b, os orbitais vazados comportam dois pares de elétrons não-ligantes do átomo de oxigênio, que podem formar as ligações com o hidrogênio, que está parcialmente positivo. Cada molécula de água pode, dessa forma, acomodar um número máximo de quatro ligações de hidrogênio: duas através dos orbitais do oxigênio e duas através dos átomos de hidrogênio que vão acomodar duas outras moléculas de água. A Fig. 3 mostra como esse arranjo ocorre no gelo.

A existência desse tipo de ligação explica várias propriedades importantes da água. O fato de a água ser líquida à temperatura ambiente é um deles. Moléculas maiores que a água

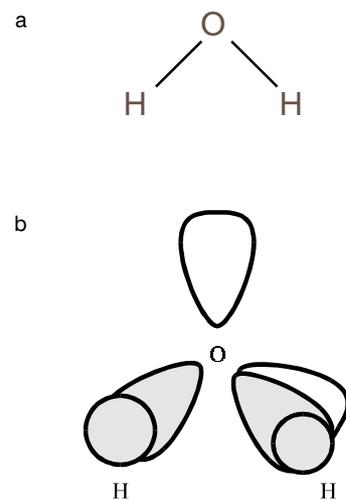


Figura 1: Representações para a molécula de água. a: representação mais usual; b: representação usando orbitais.

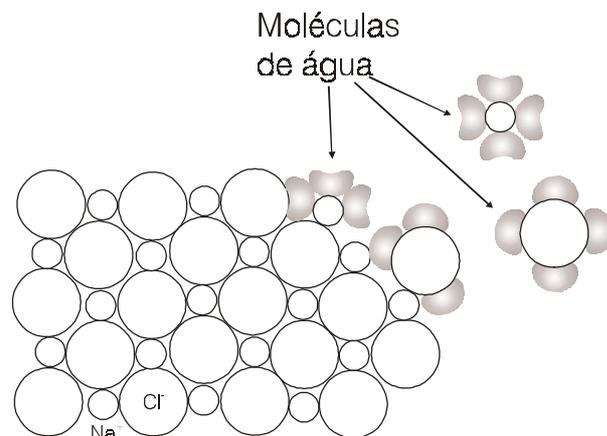


Figura 2: Modelo para a solvatação dos íons de um sólido iônico.

— como CO_2 e NH_3 (amônia) — são gasosas. A forte atração existente entre as moléculas de água, através das ligações de hidrogênio, explica essa propriedade incomum. Por outro lado, a notável propriedade de o gelo ser menos denso que a água líquida está relacionada ao fato de cada molécula de água formar o número máximo de quatro ligações de hidrogênio com suas vizinhas no estado sólido. No estado líquido, cada molécula pode formar, em média, 3,4 ligações de hidrogênio com suas vizinhas. Esse número fracionário se explica pelo fato de que, em consequência do constante deslocamento das moléculas no estado líquido, ligações de hidrogênio são, constante e rapidamente, quebradas e formadas. Embora em qualquer instante a maioria das moléculas na água líquida esteja formando ligações de hidrogênio, a vida média de cada uma dessas ligações é da ordem de 10^{-9} s. Isso explica porque a água líquida é fluida. Se as ligações de hidrogênio persistissem por um tempo maior, a água tenderia a se tornar viscosa, como acontece com a glicерina, que também forma ligações de hidrogênio entre suas moléculas.

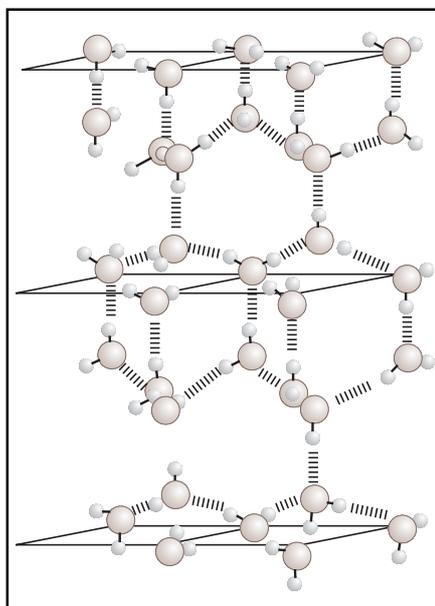


Figura 3: Arranjo cristalino das moléculas de água no gelo.

A fórmula química da água é um importante instrumento para explicar várias de suas propriedades, inclusive as mais notáveis e incomuns

Quando a água passa para o estado sólido, cada molécula de água passará a acomodar um número máximo de quatro ligações de hidrogênio. Como as moléculas no estado sólido geralmente não se deslocam —

apenas vibram em torno de suas posições no retículo cristalino — essas ligações de hidrogênio são duráveis. Para acomodar esse grande número de ligações, o arranjo cristalino do gelo é bastante ‘aberto’, pois as

moléculas acomodam-se em arranjos hexagonais, restando grandes espaços vazios no interior desses hexágonos (Fig. 3). Isso faz com que o arranjo ocupe um volume maior, o que explica a menor densidade do gelo. Quando o gelo se funde, esses vazios desaparecem e as moléculas de água podem ficar mais próximas umas das outras, o que faz com que o volume ocupado por elas diminua, aumentando a densidade.

É problemático, portanto, pensar na existência de moléculas individuais na água sólida e na água líquida. Essas moléculas estão constantemente se ligando a outras, formando grupos de moléculas. Portanto, a fórmula H_2O parece ser realmente apropriada somente para a água no estado gasoso, a baixas pressões e altas temperaturas. A água gasosa, sendo constituída por moléculas individuais, não é visível e não deve ser confundida com o vapor que vemos saindo de uma chaleira fervente. O ‘vapor’ visível é água líquida que se condensou em pequenas gotículas que permanecem em suspensão no ar. As gotículas têm dimensões visíveis, o que não ocorre com as moléculas, que são invisíveis.

Mesmo a idéia de que a água

gasosa seja formada por moléculas individuais não pode deixar de considerar que essas moléculas são dinâmicas e podem trocar átomos entre si. A idéia da existência de moléculas individuais no estado gasoso tem de ser compatibilizada com a observação experimental de que, ao se misturar, na fase gasosa, 50% de água comum (H_2O) e 50% de água pesada (D_2O , onde D representa deutério, um isótopo mais pesado do hidrogênio), obtêm-se, depois de certo tempo, uma grande quantidade de moléculas de água com a fórmula HDO. As moléculas de água interagem dinamicamente no estado gasoso.

Todas essas considerações nos levam a concluir que a fórmula química da água — H_2O — é um importante instrumento para explicar várias de suas propriedades, inclusive as mais notáveis e incomuns. No entanto, a fórmula nada mais é que uma representação da substância. Como tal devemos usá-la, apropriando-nos das informações que ela pode nos fornecer mas tomando o cuidado de não confundir-la com a realidade da substância água, muito mais complexa e profunda do que aquilo que duas letras do alfabeto e um número permitem antever.

A fórmula H_2O nada mais é que uma representação da substância. Como tal devemos usá-la, apropriando-nos das informações que ela pode nos fornecer mas tomando o cuidado de não confundir-la com a realidade da substância água, muito mais complexa e profunda do que aquilo que duas letras do alfabeto e um número permitem antever

beto e um número permitem antever.

Eduardo Fleury Mortimer é bacharel e licenciado em química pela UFMG, doutor em educação pela USP e professor na Faculdade de Educação da UFMG.

Nota

1. Alfeu Trancoso, em “Reflexões no Cipó”, *Estado de Minas*, 18 de novembro de 1994.

Para Saber Mais

BELTRAN, Nelson Orlando. Por que a água se dilata ao ser congelada? *Revista de Ensino de Ciências* n° 17, março de 1987, São Paulo, p. 58-59.