



## O QUE É A QUÍMICA?

A Ciência Central que Explica a Matéria e  
Constrói o Nosso Mundo



Digitalizado, Corrigido e Adaptado por  
Gullan Greyl

<http://www.gullangrey.pt>

1ª Edição, 2013

08-12-2025

### Síntese

A maioria das pessoas lembra-se da química dos seus tempos de escola como um assunto que era amplamente incompreensível. Para muitos, o tópico era visto como rico em factos, mas pobre em compreensão, fedorento e tão distante do mundo real de eventos e prazeres que parecia fazer pouco sentido, exceto para os mais introvertidos, em chegar a um acordo com os seus conceitos, feitiços, receitas e regras sujas.

Peter Atkins quer mudar tudo isso. *Em O Que é a Química?* ele encoraja-nos a olhar para a química de novo, através dos olhos de um químico, para entender os seus conceitos centrais e ver como ela contribui não apenas para o nosso conforto material, mas também para a cultura humana. Ele mostra como a química fornece a infraestrutura do nosso mundo, por meio da indústria química, dos combustíveis de aquecimento, geração de energia e transporte, bem como dos tecidos das nossas roupas e móveis.

Ao considerar as conquistas notáveis que a química fez e examinar o seu lugar entre a física e a biologia, Atkins apresenta uma exploração fascinante, clara e rigorosa do mundo da química – a sua estrutura, conceitos centrais e contribuições.

## Índice

PREFÁCIO .....	3
CAPÍTULO 1.....	6
AS SUAS ORIGENS, ABRANGÊNCIA E ORGANIZAÇÃO .....	6
CAPÍTULO 2.....	18
OS SEUS PRINCÍPIOS: .....	18
ÁTOMOS E MOLÉCULAS .....	18
CAPÍTULO 3.....	32
SEUS PRINCÍPIOS: .....	32
ENERGIA E ENTROPIA .....	32
CAPÍTULO 4.....	42
AS SUAS REAÇÕES.....	42
CAPÍTULO 5.....	56
AS SUAS TÉCNICAS.....	56
CAPÍTULO 6.....	68
AS SUAS CONQUISTAS .....	68
CAPÍTULO 7 .....	87
O SEU FUTURO.....	87
GLOSSÁRIO .....	96

# PREFÁCIO

---

Espero abrir os seus olhos e mostrar-lhe um mundo fascinante, de importância intelectual e económica, o mundo da química. A química, tenho de admitir, tem uma reputação infeliz. As pessoas lembram-se dela dos tempos de escola como uma disciplina em grande parte incompreensível, rica em factos, mas pobre em compreensão, cheirosa e tão afastada do mundo real de acontecimentos e prazeres que parecia não haver grande razão para lidar com os seus conceitos sujos, feitiços, receitas e regras. Mais tarde na vida, essa reputação infeliz muitas vezes se torna ainda mais sombria pela consciência do impacto ambiental de produtos químicos nocivos que escapam para a natureza, causando desastre em prados bucólicos verdejantes cobertos de trevo, habitat da papoila luminosa e da borboleta dançante, transformando em lama inóspita as margens onde crescia o tomilho selvagem, gerando lamas tóxicas e viscosidades nocivas onde antes corriam riachos límpidos, substituindo o ar perfumado pelo deleite eólico por pungência e, em geral, estragando as coisas.

Quero mudar tudo isso. Quero incentivá-lo a olhar de novo para a química, com olhos modernos e desprovidos de preconceitos, varrendo memórias e atitudes antigas e substituindo-as por compreensão e apreço. Quero mostrar-lhe o mundo através dos olhos de um químico, compreender os seus conceitos centrais e ver como um químico contribui não só para o nosso conforto material, mas também para a cultura humana. Quero explicar como os químicos pensam e como o que revelam sobre a matéria — todas as formas de matéria, desde rochas até humanos — acrescenta prazer à nossa percepção do mundo. Quero mostrar-lhe como os químicos pegam numa forma de matéria, talvez sugada ou extraída do solo ou colhida dos céus, e transformam-na noutra forma, talvez para nos vestir, alimentar ou confortar.

Quero partilhar consigo o pensamento de que a química fornece a infraestrutura do mundo moderno. Quase nenhum item da vida quotidiana não é provido por ela ou baseado nos materiais que criou. Tire a química e o seu braço funcional, a indústria química, e tira os metais e outros materiais de construção, os semicondutores da computação e comunicação, os combustíveis para aquecimento, geração de energia e transporte, os tecidos de vestuário e mobiliário, e os pigmentos artificiais do nosso mundo deslumbrantemente colorido. Tire as suas contribuições para a agricultura e deixará morrer pessoas, pois a indústria fornece os fertilizantes e pesticidas que permitem às terras limitadas sustentar populações em crescimento. Tire

o seu braço farmacêutico e permitirá a dor pela eliminação de anestésicos e negará às pessoas a possibilidade de recuperação pela eliminação de medicamentos. Imagine um mundo sem produtos da química (incluindo água pura): estaria de volta a antes da Idade do Bronze, na Idade da Pedra: sem metais, sem combustíveis exceto madeira, sem tecidos exceto peles, sem medicamentos exceto ervas, sem métodos de cálculo exceto com os dedos, e muito pouca comida.

Os avanços tecnológicos exigem a disponibilidade de materiais com propriedades novas e sofisticadas, seja em propriedades elétricas, magnéticas, óticas ou mecânicas, ou apenas maior pureza. Os avanços na manutenção da saúde humana, que podem reduzir a pressão sobre a infraestrutura física dos hospitais e o seu equipamento sofisticado e caro, dependem da descoberta e fabrico de medicamentos melhores e mais sofisticados. Não haverá avanços na geração, utilização e conservação de energia sem a química fornecer a sua infraestrutura material.

É óbvio, no entanto, que a diferença extraordinária entre a natureza bruta e o que a química transforma para melhorar e prolongar as nossas vidas tem um preço, e é esse preço que nos inquieta e que é justamente a base da nossa apreensão quanto ao impacto ambiental da química. Na sua forma mais crua, os produtos da química aumentam a nossa capacidade de matar e ferir, pois a armamentística melhora quando novos explosivos e outros agentes são aperfeiçoados. Frequentemente, a preocupação mais permanente e vocal é o impacto ambiental inegável do que é produzido e dos processos de produção. A química dá às sociedades a capacidade, por escolha governamental, de fazer guerra mais eficazmente, por pressões comerciais para produzir artefactos de forma mais agressiva, e por escolha pessoal para desperdiçar mais e, assim, prejudicar o nosso ecossistema único e insubstituível.

Vou enfrentar essa preocupação nestas páginas, pois tem sido uma consequência do progresso na produção química e da presença não apenas dos seus produtos, mas também dos resíduos da sua fabricação no ambiente. É importante, contudo, ter em mente uma visão equilibrada da química, e não um único aspeto negro. Sem química, a vida seria desagradável, brutal e curta. Com química, pode ser confortável, divertida e bem alimentada. O transporte pode ser eficiente; a roupa sedutora. As vidas podem ser mais longas. Sem ignorar o lado negativo e sombrio da química, encorajarei também a apreciar o lado iluminador e positivo.

Há outra dimensão de todas estas contribuições: o entendimento. A química fornece percepção sobre o coração da matéria, mostrando como as

coisas são. Um químico pode olhar para uma rosa e compreender por que é vermelha, olhar para uma folha e compreender por que é verde. Um químico pode olhar para o vidro e compreender por que é frágil, olhar para um tecido e compreender por que é flexível. As glórias da Natureza, claro, podem ser experienciadas sem este conhecimento interno, assim como a música pode ser apreciada sem análise; mas a compreensão que a química proporciona sobre as propriedades da matéria, em todas as suas formas, pode ser aproveitado quando o momento é oportuno, aumentando o prazer de forma mais profunda. Procuro partilhar consigo alguma dessa compreensão e mostrar que mesmo um pouco de química acrescenta prazer ao quotidiano.

Em termos gerais, essa é a viagem que lhe proponho. Tentarei desalojá-lo das memórias semirrecordadas e possivelmente desagradáveis do seu primeiro encontro com a química. Não terá um grau em química ao terminar estes capítulos, pois a química é profunda e extensa, quantitativa e qualitativa, subtil e superficial. Espera-se, contudo, que aprecie a sua estrutura, os seus conceitos centrais e as suas contribuições para a cultura, prazer, economia e mundo.

Para concluir, gostaria de agradecer ao Professor David Phillips, do Imperial College, por várias observações úteis.

Peter Atkins

Oxford, 2013

# CAPÍTULO 1

---

## AS SUAS ORIGENS, ABRANGÊNCIA E ORGANIZAÇÃO

---

Este capítulo, após um breve olhar sobre as origens da química na alquimia, salienta que todas as discussões modernas sobre a disciplina se fazem em termos de átomos, a “moeda” da química moderna. À medida que a química moderna surgiu, dividiu-se em várias subdisciplinas interligadas, sendo as mais centrais a química física, inorgânica e orgânica, e descrevo as suas áreas de interesse. Contudo, a química é uma ciência central, retirando os seus conceitos da física e iluminando a biologia, e este capítulo introdutório conclui com uma discussão sobre como se integra atualmente no panorama científico.

**G**anância. A ganância levou a humanidade a embarcar numa jornada extraordinária que hoje toca toda a gente. A variedade particular de ganância que tenho em mente foi simultaneamente a busca da imortalidade e a obtenção de riquezas ilimitadas. A suposta via para ambas era a manipulação da matéria para fornecer elixires capazes de superar os males do corpo rumo à realização da imortalidade, e fórmulas para converter praticamente qualquer coisa que se assemelhasse ao ouro — seja na cor, como a urina e a areia, seja no peso, como o chumbo — em ouro propriamente dito. Nenhum dos objetivos foi alguma vez alcançado, mas o incessante experimentamento com a matéria por parte dos alquimistas deu-lhes uma familiaridade considerável com ela e forneceu o composto, muitas vezes literalmente, do qual viria a emergir uma ciência verdadeira — a química.

O principal instrumento da transição da alquimia para a química foi a balança. A capacidade de pesar coisas com precisão colocou nas mãos da humanidade o potencial de associar números à matéria. A relevância dessa conquista não deve passar despercebida, pois é de facto extraordinário que se possam atribuir números significativos ao ar, à água, ao ouro e a todos os outros tipos de matéria. Assim, através da associação de números, o

estudo da matéria e das transformações que pode sofrer (o âmbito atual da química) foi integrado no domínio das ciências físicas, onde conceitos qualitativos podem ser traduzidos em termos quantitativos e testados rigorosamente face às teorias que os enquadram e iluminam.

Pesar a matéria antes e depois de esta sofrer a transformação de uma substância noutra conduziu ao conceito principal que sustenta todas as explicações da química: o átomo. A noção de “átomo” vagueava sem fundamento na consciência humana há mais de dois milénios, desde que os antigos gregos haviam especulado, sem uma réstia de evidência, acerca de algum tipo de granulação última, indivisível, da estrutura do mundo. Essa especulação ganhou fundamento científico nas mãos de John Dalton (1766–1844) que, através da análise dos pesos das substâncias antes e depois da reação, concluiu que os elementos, os blocos de construção fundamentais da matéria, são constituídos por átomos imutáveis, e que se podia manter o seu rasto à medida que uma substância se transformava noutra através do simples expediente de pesar.

Os átomos são agora a moeda corrente da química. Quase todas as explicações em química lhes fazem referência, seja enquanto entidades individuais, seja agrupados nas combinações a que chamamos moléculas. Os átomos são os constituintes de toda a matéria: tudo o que pode ver e tocar é feito de átomos. Por muito pequenos que sejam, é totalmente errado dizer que são invisíveis ao olho nu. Olhe para uma árvore: está a ver átomos. Olhe para uma cadeira: está a ver átomos. Olhe para esta página: está a ver átomos (mesmo que esta página esteja num ecrã). Toque no seu rosto: está a tocar em átomos. Toque num tecido: está a tocar em átomos. Claro que um átomo individual é demasiado pequeno para ser visto; mas a matéria é construída a partir de batalhões deles, e esses batalhões em enxame são visíveis ao olho nu sob a forma das substâncias que nos rodeiam. Mais adiante, no Capítulo 5, explicarei como os químicos conseguem hoje ver imagens de átomos individuais.

Existem pouco mais de 100 tipos diferentes de átomos. O que quero dizer exatamente com “tipo” explicá-lo-ei no capítulo

seguinte, quando juntos olharmos para o seu interior e identificarmos as diferentes estruturas internas que os tornam distintos. Cada tipo diferente de átomo corresponde a um elemento distinto. Assim, tal como existem os elementos hidrogénio, carbono, ferro, e por aí fora, existem átomos de hidrogénio, átomos de carbono, átomos de ferro, e assim sucessivamente, até ao elemento descoberto mais recentemente, que em 2013 é o totalmente inútil e extremamente efémero 114.<sup>o</sup> elemento, o livermório. (Para ser preciso: é o elemento 116, mas dois que o antecederem aguardam descoberta.) A ideia central da química é que, quando uma substância se transforma noutra, os átomos não mudam: limitam-se a trocar de parceiros ou a entrar em novas disposições. A química é, no fundo, um assunto de divórcios e recasamentos.

Embora “átomo” signifique “incortável”, os átomos podem ser cortados. Mesmo uma especulação de poltrona conduz a essa conclusão, pois a existência de diferentes tipos de átomos implica a posse de estruturas diferentes, pelo que, com engenho suficiente, é provável que um átomo possa ser despedaçado e que as chamadas partículas subatômicas de que é formado possam ser identificadas. A experiência confirma esta especulação, e veremos algo do interior dos átomos e, assim, as origens das suas diferentes personalidades no Capítulo 2. É aqui que a química recorre mais intensamente à física, pois foram os físicos que desvendaram as estruturas dos átomos, e são os químicos que utilizam essa informação para explicar as moléculas que formam e as reações que realizam.



Esta última observação insinua o âmbito da química. Implica que, para compreender a química, é necessário importar conceitos da física. E assim é, de facto, e a química bebe profundamente de inúmeros conceitos desenvolvidos por físicos (em troca, nós, químicos, fornecemos-lhes a matéria com que fazem magia). Entre estas trocas há duas importações de enorme importância: uma relacionada com o comportamento de átomos individuais e dos seus componentes subatômicos, e outra relacionada com agregados, isto é, versões tangivelmente grandes da matéria, como um jarro de

água ou um bloco de ferro. Mais tecnicamente, tratam-se dos mundos microscópico e macroscópico, respectivamente.

A importação crucial da física para explicar as propriedades do mundo microscópico dos átomos e moléculas individuais é a mecânica quântica. Embora grande parte da química tenha sido desenvolvida durante o século XIX, havia pouca compreensão do porquê de certas coisas acontecerem e outras não. Na época, a “mecânica clássica” de Isaac Newton — os procedimentos matemáticos para explicar o movimento dos corpos — reinava, pois era tão bem-sucedida a explicar as órbitas dos planetas e o voo das bolas, e esperava-se que, ao reduzir planetas e bolas à escala atômica, surgissem explicações químicas e que o domínio de Newton viesse a abarcar também a química. A sua dedicação infrutífera à manipulação alquímica talvez fosse um sinal de que ele próprio acreditava nisso. Contudo, no final do século XIX e início do século XX descobriu-se que esta redução de planetas e bolas a átomos resultava no fracasso completo da mecânica clássica: até os conceitos fundamentais em que se baseava se desmoronavam quando aplicados a átomos e aos seus constituintes. Eis os perigos de uma extrapolação irrefletida.

Então, no início do século XX, por volta de 1927, nasceu uma nova mecânica que se revelou extraordinariamente bem-sucedida na explicação de como os átomos e as partículas subatômicas desempenham o seu papel. Até hoje, essa teoria — a mecânica quântica — não foi superada em poder preditivo e precisão numérica. Que permaneça largamente incompreensível é, reconhecidamente, uma deficiência irritante, mas oportunamente farei o possível para destilar dela o necessário para compreender o comportamento dos átomos e, por conseguinte, de toda a química. Veremos que, quando os químicos mexem e fervem os seus fluidos, estão a persuadir os átomos a comportarem-se de acordo com as leis estranhas da mecânica quântica.

A outra importação crucial da física, neste caso para explicar as propriedades do mundo macroscópico da matéria em agregado, é a *termodinâmica*. A termodinâmica é a ciência da energia e das transformações que esta pode sofrer. Surgiu em grande parte devido à dependência vitoriana da máquina a vapor para

propulsionar as sociedades, tanto literal como economicamente, mas cedo se revelou uma parte essencial da estrutura da química. A estrutura material da nossa disciplina são os átomos, mas as mudanças que estes sofrem encontram-se sob o controlo e o impulso da energia. Veremos que não só a energia é libertada quando um combustível arde — um aspeto óbvio, útil, mas primitivo da sua participação na química — como também governa de forma geral o comportamento dos átomos, as estruturas que podem formar, as mudanças de organização que podem sofrer e a velocidade a que essas mudanças podem ocorrer. A energia também se revela, de forma subtil, a força motriz da química, no sentido em que as reações são impelidas para a frente por ela, como explicarei no Capítulo 3. Dado que a energia está intimamente entrelaçada com a própria estrutura da química, não deve surpreender que a termodinâmica desempenhe um papel na disciplina apesar das suas origens na engenharia.

Enquanto a química desce até à física para obter explicações (e, através da física, desce ainda mais até à matemática para a sua formulação quantitativa), estende-se para cima até à biologia para muitas das suas aplicações mais extraordinárias. Isso não deve surpreender, pois a biologia é meramente uma elaboração da química. Antes que os biólogos irrompam em indignação perante essa observação, que pode parecer semelhante a afirmar que a sociologia é uma elaboração da física de partículas, deixo claro o que quero dizer. Os organismos são construídos a partir de átomos e moléculas, e essas estruturas são explicadas pela química. Os organismos funcionam, isto é, estão vivos, devido à complexa rede de reações que têm lugar no seu interior, e essas reações são explicadas pela química. Os organismos reproduzem-se através da utilização de estruturas e reações moleculares, que pertencem igualmente à química. Os organismos respondem ao ambiente — por exemplo, através do olfato e da visão — por mudanças na estrutura molecular, e assim essas respostas — todos os nossos cinco ou mais sentidos — são elaborações da química. Até mesmo esse fenómeno hipermacroscópico, a evolução e a origem das espécies, pode ser visto como o desdobramento elaborado das consequências da Segunda Lei da Termodinâmica, sendo por isso um aspeto da química. Alguns organismos — penso sobretudo nos

seres humanos — refletem sobre a natureza do mundo, e os processos mentais que sustentam e se manifestam nessas reflexões resultam de redes elaboradas de reações químicas. Assim, a biologia é efetivamente uma elaboração da química. Não insistirei, seja qual for a minha opinião real, que todos os assuntos de interesse para os biólogos, como o comportamento animal em geral, são também meras elaborações químicas, mas limito-me a afirmar que todas as estruturas, respostas e processos dos organismos são químicos. A química, portanto, impregna a biologia e contribuiu imensamente para a nossa compreensão dos organismos.

Nós, enquanto elaboradores sociais de organismos — nós, seres humanos — construímos coisas. Fabricamos artefactos. Extraímos as pedras da Terra, bombeamos os fluidos das profundezas, colhemos os gases dos céus e procuramos transformar toda essa matéria-prima em tudo aquilo que desejamos. A conversão desses materiais brutos em substâncias que podem ser moldadas, marteladas, fiadas, coladas, comidas ou simplesmente queimadas faz parte da química. Os químicos podem afastar-se e permitir que moldadores moldem, marteladores martelam, modeladores modelem e, em geral, que fabricantes fabriquem para criar o artefacto final, mas são eles que forneceram a matéria-prima, a infraestrutura da nossa sociedade tecnológica moderna, e que contribuíram de forma imensa para as economias mundiais e para o comportamento de indivíduos e nações.

Como enfatizei no Prefácio, há, naturalmente, manchas e borrões de negro no meio de tanta luz. A química contribuiu certamente para a capacidade humana de mutilar e matar, e seria inadequado, nesta panorâmica do que é a química, varrer das suas páginas o fornecimento de explosivos, de gases nervosos, bem como as imposições acidentais e intencionais sobre o nosso ambiente frágil. Enfrentarei estas questões mais adiante, mas nesta fase — para sublinhar a importância do juízo pessoal — convido-o a eliminar todas as contribuições da química para o mundo moderno, o que lhe levará de volta à Era dolorosa, perigosa, desconfortável e aspiracionalmente limitada da Idade da Pedra, e a perguntar então a si próprio se a escuridão atual supera a luz.



O âmbito da química, portanto, é tão vasto que a minha introdução ao tema, bem como o próprio assunto, vaguearia amorfa como uma baleia encalhada e sem espinha dorsal, não fosse a imposição de algum tipo de estrutura. Os químicos foram convergindo para uma estrutura que lhes permite exercer as suas atividades, reunir-se em assembleias de afinidades comuns e desenvolver os seus procedimentos de forma semelhante à maneira como os Estados individuais desenvolvem as suas políticas e economias. Ao contrário da maioria dos Estados, os limites são difusos e, muitas vezes, surgem avanços surpreendentes onde duas culturas se sobrepõem. É particularmente esse o caso quando o tema é tão maduro como a química atualmente é, com cada domínio de atividade amplamente explorado e com a inspiração a brotar, tal como na arte, nas fronteiras férteis onde a química se cruza com outras disciplinas.

Para os nossos propósitos, e para compreender a estrutura geral da química no contexto desta introdução, é útil reconhecer a sua divisão em vários ramos e perceber, em termos amplos, as suas áreas de interesse. As divisões da química continuam a permear departamentos universitários, cursos e as revistas onde são reportadas novas descobertas, pelo que uma descrição dessas divisões continua a ser um elemento importante do guia para qualquer visitante. Mas fica o aviso: as fronteiras, tanto intelectuais como departamentais, estão a dissolver-se.

A divisão mais ampla, mais importante e convencional — e ainda hoje amplamente respeitada — é a que separa a *química física*, a *química orgânica* e a *química inorgânica*.

A **química física** situa-se na interface entre a física e a química (daí o nome) e ocupa-se dos princípios da química que, como vimos, assentam largamente na mecânica quântica para explicar as estruturas dos átomos e das moléculas e na termodinâmica para avaliar o papel e a aplicação da energia. Ocupa-se também das velocidades a que as reações ocorrem, tanto ao nível macroscópico como ao microscópico. Neste último caso, procura acompanhar a vida íntima das moléculas individuais enquanto são despedaçadas e depois reconstruídas como

substâncias diferentes durante as reações. Uma atividade central da química física é a sua contribuição para a interpretação de técnicas de investigação, particularmente a “espectroscopia”.

Como veremos no Capítulo 5, a espectroscopia utiliza diversos tipos de luz para trazer informação a partir do interior das moléculas até aos olhos — cada vez mais olhos sintéticos — do observador. Tal é o nível de sofisticação destas técnicas que os químicos físicos têm de convocar todo o seu arsenal, especialmente a mecânica quântica, para interpretar os dados. Na verdade, as atividades de químicos e físicos confundem-se de tal maneira neste domínio que, para alguns, o nome química física funde-se com física química, sobretudo quando estudam o comportamento de moléculas individuais com uma abordagem muito próxima da de um físico.

A **química orgânica** é a parte da química que se dedica aos compostos de carbono. O facto de um único elemento justificar uma divisão inteira é testemunho da sua prenhe mediocridade. O carbono encontra-se no ponto médio da Tabela Periódica, o mapa das propriedades químicas dos elementos, e é largamente indiferente às ligações em que se envolve. Em particular, aceita ligar-se a si próprio. Como resultado do seu carácter dócil e não agressivo, consegue formar cadeias e anéis de complexidade surpreendente. Complexidade surpreendente é precisamente o que os organismos necessitam para serem considerados vivos, e assim os compostos de carbono constituem a infraestrutura estrutural e reativa da vida. Tão extensos são os compostos de carbono — atualmente na casa dos milhões — que não surpreende que todo um ramo da química tenha evoluído para os estudar e tenha desenvolvido técnicas próprias, sistemas de nomenclatura específicos e atitudes distintas.

Porquê “orgânica”? Tal é a complexidade intrincada das moléculas em que o carbono participa (salvo algumas exceções, como o simples dióxido de carbono), que se pensava originalmente que só a Natureza poderia formá-las. Segundo esta visão “vitalista”, eram produtos exclusivos dos organismos. O princípio do fim do vitalismo surgiu em 1828, quando se demonstrou que um mineral simples podia ser convertido num composto “orgânico” característico (nomeadamente a ureia). Embora o debate tenha

durado algum tempo, desde então o “orgânico” da química orgânica tornou-se um arcaísmo; mas arcaísmos convenientes são difíceis de desalojar e o termo sobrevive, passando agora a significar apenas “um composto de carbono”.

Resta, então, o conjunto dos outros elementos — cerca de uma centena — para além do carbono. O seu estudo pertence ao domínio da **química inorgânica**. Como seria de esperar de um ramo que lida com mais de 100 elementos de personalidades amplamente diversas, a química inorgânica é um campo vital, mas vasto e disperso. Essa dispersão é parcialmente contida pela adoção de diversas subdivisões do tema. Uma das principais é a química do estado sólido, cujo objeto de estudo são sólidos inorgânicos, tais como os materiais que funcionam como supercondutores e os semicondutores que tornaram possível a computação universal. É difícil resistir à analogia entre a química inorgânica e uma orquestra de cem instrumentos, com o químico maestro-compositor a extrair sinfonias de combinações ao ordenar os instrumentos em conformidade.

O carbono não está a salvo do olhar escrutinador do químico inorgânico que percorre a Tabela Periódica. Alguns dos compostos mais simples de carbono, como o dióxido de carbono que já mencionei, o gás mortal monóxido de carbono, e o giz e o calcário que moldam as nossas paisagens, são prontamente cedidos pelos químicos orgânicos, que os consideram de pouco interesse, sendo por convenção classificados como inorgânicos. Na fronteira entre as divisões, contudo, encontram-se compostos que são estruturas intrincadas de átomos de carbono, mas que incluem também átomos de vários metais. Muitos destes compostos são catalisadores essenciais na indústria química; alguns são cruciais para o funcionamento dos organismos. É aqui que se situam os domínios interdivisionais da química organometálica, que, no seu melhor, representam uma colaboração altamente frutuosa entre químicos orgânicos e inorgânicos.

+++

Tais são as três divisões principais da química. Esta lista está longe de esgotar todas as maneiras pelas quais os químicos repartem o seu domínio para melhor o digerirem, mas todas as

restantes colhem técnicas, conceitos e inspiração destas três, em proporções variadas, temperando a mistura com aspectos de outras disciplinas. Seria um empreendimento considerável enumerá-las todas, mas convém ter consciência das mais comuns.

A **química analítica** é a descendente moderna da antiga busca por descobrir o que está presente. O que existe num mineral? Poderá haver ouro ou será háfnio? O que existe no petróleo bruto? O que contém para além dos hidrocarbonetos e quais são esses hidrocarbonetos? Que composto é esse que sintetizou? Consegue deduzir a disposição dos seus átomos? Todas estas são questões que um químico analítico pode tentar responder. Embora tubos de ensaio, balões e retortas ainda desempenhem um papel nos seus métodos, muitas das suas investigações são hoje realizadas em máquinas sofisticadas, algumas recorrendo à espectroscopia e outras a técnicas desenvolvidas por químicos inorgânicos e físicos. Exploro estas técnicas no Capítulo 4. Da química analítica deriva a **química forense**, na qual as técnicas da química analítica são usadas para fins legais, para identificar ou ilibar suspeitos e para analisar cenas de crime.

A **bioquímica** é a contribuição de retorno da química orgânica para a biologia, por vezes com um toque de química inorgânica acrescentado. Dedicar-se inteiramente às estruturas e reações que constituem os seres vivos, desvendando as vias metabólicas que transformam alimento em ação (incluindo a ação confinada ao cérebro: o pensamento). Os organismos continuam a ser um reservatório vastíssimo de moléculas orgânicas, pois a Natureza teve milhares de milhões de anos para explorar nichos estruturais, e os bioquímicos desempenham um papel central tanto na descoberta do que existe como na determinação de como foi produzido sob o comando das abelhas-operárias do corpo: as proteínas a que chamamos enzimas. Uma preocupação antropocêntrica, mas importante, relacionada com a extinção de espécies, é que esta elimina fontes de moléculas intrincadas que levaram milhões de anos a surgir.

O nome da **química industrial** fala por si. Aqui o químico encontra o engenheiro, e as reações estabelecidas em tubos de ensaio e recipientes afins são ampliadas a uma escala enorme e

tornadas adequadas para contribuir para a atividade comercial. Os químicos industriais contribuem enormemente para a economia e para o comércio entre nações. Só no Reino Unido, os produtos químicos representam 20 por cento do produto interno bruto, e nos Estados Unidos mais de 96 por cento de todos os bens manufaturados são diretamente influenciados pela química. Tais números, relativos aos produtos químicos manufaturados, não são, quase literalmente, para ser ignorados. Uma preocupação central da química industrial contemporânea é a química verde, cujo propósito é minimizar resíduos, aumentando assim a eficiência económica, e reduzir o impacto ambiental, promovendo a aceitabilidade e a sustentabilidade.



A química deve muitas dívidas às disciplinas que a rodeiam no panorama intelectual, mas essas disciplinas também lhe devem bastante.

A física deve-lhe dívidas, particularmente no domínio da eletrónica e, cada vez mais, da fotónica (a utilização de luz em vez de eletrões para transmitir informação e manipular dados). Os químicos criam os semicondutores sem os quais a computação permaneceria confinada à escala industrial de onde inicialmente emergiu. Formulam também os vidros utilizados em fibras ópticas, sem os quais a transferência de informação ficaria profundamente limitada.

A biologia deve uma dívida enorme à química, especialmente desde o surgimento da biologia molecular, originada em grande parte pela identificação da estrutura do ADN e pela sua interpretação como o portador da informação genética de geração em geração. É quase sem exagero afirmar que a biologia se tornou parte das ciências físicas assim que o componente químico da sua característica principal — a reprodução — foi identificado. A biologia molecular é, na realidade, uma forma de química, e a maturidade atual da química permitiu que a biologia se tornasse tão vigorosa como nunca antes. A colaboração entre biologia e química, que chamamos química medicinal, é uma das grandes e indiscutivelmente benéficas contribuições da química para a sociedade.

A sociedade deve ainda outra enorme dívida à química, pois, como afirmo no Prefácio, esta coloca ao serviço do mundo as suas contribuições materiais, presentes na medicina, na agricultura, na comunicação, no transporte e em todas as formas de construção, fabrico e decoração. Também nós, pessoalmente, devemos uma dívida à química, pois, como também reivindiquei ali, ela confere-nos um olhar interior para apreciar o mundo.

Tudo isto decorre de uma compreensão da química, que passarei agora a desdobrar.

## CAPÍTULO 2

---

# OS SEUS PRINCÍPIOS: ÁTOMOS E MOLÉCULAS

---

Há vários conceitos fundamentais que é indispensável conhecer para compreender qualquer descrição da química moderna. Este capítulo expõe, de forma muito geral, a natureza dos átomos e a maneira como estes se ligam entre si em disposições características para formar moléculas e outros tipos fundamentais de composto.

Central para qualquer discussão de química está a Tabela Periódica, essa obra-prima de organização formulada no século XIX, principalmente por Dmitri Mendeleev (1834–1907), e cuja base foi compreendida no século XX, após terem sido explicadas as estruturas dos átomos. Que a tabela é importante confirma-se pela sua ubiquidade: está pendurada nas paredes de laboratórios e salas de aula e surge impressa em todos os manuais introdutórios de química. Há uma versão perto do final deste livro. A sua importância, contudo, não deve ser exagerada. Os químicos no ativo não a contemplam todas as manhãs em busca de inspiração, nem recorrem a ela com frequência ao longo do dia. Certamente a têm em mente, pois a sua verdadeira relevância reside em resumir as relações entre os elementos e desempenhar um papel crucial na organização da informação sobre eles. Talvez o seu papel mais importante seja no ensino da química, porque, em vez de sermos confrontados com a tarefa intimidante de memorizar as propriedades de uma centena de elementos, permite inferir essas propriedades a partir da sua localização na tabela e identificar e recordar com facilidade as tendências existentes. Na verdade, Mendeleev foi levado a formular a sua tabela enquanto se preparava para escrever um manual de química introdutória.

A Tabela Periódica retrata uma característica extraordinária da matéria: o facto de os elementos estarem relacionados entre si. Estamos hoje tão familiarizados com a tabela que essa característica é facilmente esquecida. Mas imagine-se numa época

anterior à sua formulação. Então conheceria o gás oxigénio e o sólido amarelo enxofre, e quase de certeza não imaginaria que pudesse haver qualquer relação entre eles. Conheceria o gás praticamente inerte azoto e o sólido incandescente fósforo, e não conceberia que fossem aparentados. E o que dizer do cobre vermelho, do zinco cinzento e do mercúrio líquido? Uma família? Certamente que não! Como poderia sequer ser possível que diferentes formas de matéria fossem irmãos ou primos? A própria ideia de relações familiares entre substâncias distintas era praticamente inconcebível.

A Tabela Periódica, contudo, revela que os elementos estão de facto relacionados entre si. O oxigénio e o enxofre são primos e encontram-se lado a lado na tabela; o mesmo sucede com o azoto e o fósforo; o cobre, o zinco e o mercúrio fazem parte da mesma família e estão agrupados. As suas aparências tão distintas são diferenças superficiais, porque, quando se investigam as reações em que participam e as moléculas que formam, descobrem-se profundas semelhanças entre estes parentes. Essas semelhanças resultam das estruturas dos seus átomos e, para as compreender, é precisamente a esses átomos que devemos agora voltar.



Talvez tenha sido um pouco desconcertante, da minha parte, mencionar no Capítulo 1 que, para compreender as estruturas dos átomos, seria necessário recorrer à mecânica quântica e a todas as suas incompreensibilidades. No entanto, também referi que destilaria dessa teoria extraordinária apenas os conceitos e informações que nos dizem respeito. Tendo essa restrição em mente, conclui-se que os átomos têm uma estrutura bastante simples e que é relativamente fácil compreender as relações entre os elementos e perceber, à medida que esta exposição avança, por que é que algumas combinações de átomos são permitidas e outras não.

A estrutura básica de um átomo consiste num núcleo rodeado por uma nuvem de eletrões. Este é o “átomo nuclear”, o modelo de átomo identificado pela primeira vez por Ernest Rutherford (1871–1937) em 1911. O núcleo é positivamente carregado, os eletrões são negativamente carregados, e é a atração entre estas cargas

opostas que é responsável pela existência e sobrevivência do átomo. Como é bem sabido, os átomos são muito pequenos: há mais de um milhão de átomos de carbono no (versão impressa do) ponto final desta frase. Um núcleo é ainda mais pequeno: se um átomo fosse ampliado até ao tamanho de um estádio de futebol, o núcleo teria o tamanho de uma mosca no seu centro.

Começarei pelo centro do átomo e avançarei para fora. Um núcleo é constituído por dois tipos de partículas subatômicas: prótons e neutrões. Como sugerido pelas letras *p* e *n* nos seus nomes, os prótons são positivamente carregados e os neutrões são eletricamente neutros. Para além disso, são muito semelhantes, com praticamente a mesma massa. Estão firmemente ligados no núcleo, e é necessário um esforço gigantesco — algo como uma explosão nuclear — para os soltar. Na maior parte da química, com as suas libertações de energia relativamente insignificantes, o núcleo permanece inalterado e é um participante passivo, mas importante, nos processos que ocorrem em tubos de ensaio, béqueres e frascos.

O número de prótons no núcleo determina a identidade química do átomo. Assim, um átomo de hidrogénio tem um próton, um átomo de hélio tem dois, um átomo de carbono tem seis, o azoto sete, o oxigénio oito, e assim sucessivamente até ao livermório, com 116. O número de prótons no núcleo é designado número atómico do elemento. De imediato, chegamos à primeira característica extraordinária dos elementos: podem ser ordenados de acordo com o seu número atómico. Deixam de ser um conjunto aleatório. Dispõem-se numa sequência definida: hidrogénio, hélio... livermório. Além disso, como o número atómico pode ser usado como uma espécie de chamada, químicos e físicos sabem que identificaram os elementos correspondentes a todos os números atómicos até 116, à exceção (em 2013) do 113 e do 115. Sabem que não falta nenhum, exceto esses dois e o que quer que exista para além de 116.

Os neutrões são apenas passageiros nesta chamada. Um núcleo tem aproximadamente o mesmo número de neutrões que de prótons, e esse número pode variar ligeiramente. Como o número de neutrões não afeta o número atómico, o mesmo elemento pode

ter átomos com quantidades ligeiramente diferentes de neutrões e, portanto, massas diferentes. Estas versões distintas dos átomos do mesmo elemento são designadas isótopos, porque ocupam o mesmo lugar (isos = “igual” + topos = “lugar”) na Tabela Periódica. Assim, o hidrogénio tem três isótopos: o próprio hidrogénio (um protão, nenhum neutrão), o deutério (um protão, um neutrão) e o trítio (um protão, dois neutrões). O primeiro destes isótopos é de longe o mais abundante; o núcleo do trítio mal se mantém coeso e é “radioativo”, emitindo radiação ao desintegrar-se ao fim de alguns anos (o seu “tempo de semivida” é de 12,3 anos). O deutério é “hidrogénio pesado”, com cada átomo a pesar cerca do dobro do hidrogénio comum. Em combinação com o oxigénio, forma “água pesada”, que, devido ao facto de os átomos de deutério serem mais pesados do que os de hidrogénio, é cerca de 10 por cento mais pesada do que a água comum.

O número atómico — o número de protões e, portanto, a carga positiva do núcleo — determina o número de eletrões que o rodeiam. Um eletrão tem a mesma magnitude de carga elétrica que um protão, mas com sinal oposto. Assim, para que um átomo seja eletricamente neutro, o número de eletrões fora do núcleo deve ser igual ao número de protões no seu interior. Ou seja, o número de eletrões é igual ao número atómico. Assim, o hidrogénio (número atómico 1) tem um eletrão, o carbono (número atómico 6) tem seis eletrões, e assim sucessivamente até ao livermório, com os seus 116 eletrões. Os eletrões são muito mais leves do que os protões e os neutrões (por um fator de quase 2 000), pelo que a sua presença mal afeta a massa de um átomo. Exercem, no entanto, um efeito profundo nas propriedades químicas e físicas do elemento, e quase toda a química pode ser atribuída ao seu comportamento. Os químicos têm pouco interesse nos núcleos, exceto no que toca ao seu papel em determinar quantos eletrões os rodeiam. Há uma exceção: o caso muito especial do núcleo de um átomo de hidrogénio, um único protão. Explicarei o seu papel particular no Capítulo 4.

Como referi, todas as reações químicas deixam os núcleos intactos. Por outras palavras, as reações químicas não alteram a identidade dos elementos. Num instante, podemos compreender por que é que a busca desesperada dos alquimistas por métodos de

converter chumbo (elemento 82, com 82 prótons no núcleo) em ouro (elemento 79, com 79 prótons no núcleo) estava condenada ao fracasso: aquecer, mexer, bater ou esmagar em frustração não poderia arrancar os três prótons firmemente ligados ao núcleo, necessários para a “transmutação”, a conversão de um elemento noutro. A transmutação pode ocorrer, mas isso, sendo o resultado de reações nucleares, pertence ao domínio da energia nuclear e da física nuclear. Os químicos desempenham um papel vital no tratamento das consequências dos processos nucleares, especialmente na preparação de combustível nuclear e na gestão de resíduos nucleares, mas as reações químicas deixam todos os núcleos intactos e, nesta fase, apenas as reações químicas nos interessam.



O meu foco volta-se agora para as propriedades de enorme importância das nuvens de eletrões que rodeiam um núcleo. Preciso de tornar mais precisa a natureza e a estrutura dessas nuvens, pois não são apenas regiões de névoa em rotação.

Os eletrões rodeiam o núcleo em camadas, um pouco como nuvens reais que se sobrepõem, mas envolvendo todo o átomo. O conceito de um eletrão ser uma “nuvem” exige uma breve explicação. A nuvem é, na verdade, uma nuvem de probabilidade: onde é densa, é provável encontrar o eletrão; onde é rarefeita, é improvável que o eletrão se encontre.

As leis da mecânica quântica determinam que até dois eletrões rodeiem o núcleo na camada mais baixa, até oito na camada seguinte, e depois mais 18 na camada a seguir. Não precisamos de ir além disto, mas um padrão semelhante, com variações, continua indefinidamente à medida que o número de eletrões aumenta. Este padrão significa que, no hidrogénio, um único eletrão rodeia o núcleo. No carbono, com os seus seis eletrões, dois formam a nuvem do nível mais baixo e quatro mais formam nuvens circundantes na camada exterior. Pode imaginar os átomos como núcleos rodeados por camadas de nuvens semelhantes às de uma cebola, sendo cada camada interior completada antes de a seguinte começar. A razão pela qual existem estes números característicos

(2, 8, 18 ...) para as camadas sucessivas não nos deve preocupar, mas é plenamente compreendida em termos de mecânica quântica.

Está agora perante a explicação da estrutura da Tabela Periódica e das relações familiares entre os elementos. Mantenha o olhar na tabela no final deste livro e comece no hidrogénio, com o seu único eletrão. Siga para o hélio, com os seus dois eletrões. Aí, a primeira camada de nuvens fica cheia e, simultaneamente, encontramos-nos no extremo direito da tabela. O eletrão seguinte, necessário ao lítio, tem de ocupar uma nuvem na camada seguinte. Avançando pela tabela à medida que os eletrões são acrescentados, passando pelo carbono, azoto e oxigénio, completamos a camada no neão, outro gás, tal como o hélio. O eletrão seguinte tem de iniciar a camada de nuvens seguinte e leva-nos ao sódio, no extremo esquerdo da tabela, um elemento que se assemelha fortemente ao lítio, na linha acima dele, ambos com um único eletrão fora de núcleos de nuvens completos.

Tudo deverá agora estar claro: o arranjo da tabela representa o enchimento das camadas de nuvens, com um eletrão presente na camada à esquerda da tabela e a camada completada à direita. Por razões técnicas que são totalmente compreendidas, mas que aqui seriam uma distração, a ordem pela qual as camadas de nuvens são completadas torna-se um pouco confusa após as duas primeiras linhas da tabela e, embora os comprimentos das linhas correspondam aos números que já vimos, nomeadamente 2, 8, 18 ..., e possam ser reconhecidos, surgem numa ordem peculiar, mas compreendida (o padrão da Tabela Periódica é 2, 8, 8, 18, 18 ...).

O ponto crucial é que os elementos que se encontram uns por baixo dos outros apresentam padrões de cobertura de nuvens muito semelhantes. Essa é a origem das relações familiares: o oxigénio e o seu parente enxofre, na linha abaixo, têm o mesmo padrão de nuvens, sendo apenas que os seis eletrões finais do enxofre se encontram num nível mais elevado do que os seis do oxigénio. Do mesmo modo, os cinco eletrões finais do fósforo situam-se numa camada de nível mais elevado do que os cinco eletrões finais do azoto, na linha acima.

Costuma dizer-se que os átomos são maioritariamente espaço vazio. Isso simplesmente não é verdade. As distribuições nebulosas

dos elétrons preenchem todo o espaço em torno do minúsculo núcleo do tamanho de uma mosca num estádio. É certo que a nuvem é muito tênue em algumas partes; mas está lá e é onnipresente. A afirmação de que um átomo é majoritariamente espaço vazio surge da visão ultrapassada de que os elétrons são como pequenos planetas pontuais a girar em torno do núcleo a grandes distâncias, com muita vacuidade entre eles. A mecânica quântica substitui essa imagem pelas distribuições nebulosas que descrevi, nuvens que, embora muito atenuadas em certas regiões, preenchem todo o espaço.



A principal preocupação da química não é tanto com átomos individuais, mas com os compostos que estes formam ao estabelecerem uma variedade de ligações uns com os outros. Existem literalmente milhões dessas ligações já identificadas e muitas mais que sabemos que existem, mas que ainda não foram identificadas nem nomeadas. A riqueza do nosso ambiente deve-se a este vasto conjunto de compostos, e os químicos passam a maior parte do seu tempo a construir novas combinações de átomos ou a desmontar compostos para ver como estão construídos. Para o fazerem eficazmente, precisam de compreender como os átomos se ligam entre si e o que controla essas ligações, as ligações químicas que podem formar.

O que mantém os átomos unidos para formar compostos identificáveis, como a água, o sal, o metano ou o ADN? Será possível qualquer combinação de átomos, ou haverá razões para a contenção da Natureza que os químicos, apesar de todas as suas intervenções, não conseguem contornar? Por que existe variedade no mundo das substâncias, mas aparentemente não uma variedade ao acaso? Estas perguntas podem ser invertidas: por que não se juntam todos os átomos do universo numa única massa sólida colossal?

A resposta a todas estas questões reside naquelas camadas de nuvens. De um modo geral, há vantagens energéticas para um átomo quando adquire uma camada completa de nuvens. Pode fazê-lo de várias formas. Uma consiste em libertar elétrons da camada mais exterior. Isto tende a acontecer se essa camada não

tiver muitos elétrons para começar, o que significa que é mais provável nos átomos dos elementos situados à esquerda da Tabela Periódica, no início de cada nova linha e de cada nova camada de nuvens. Em alternativa, se o átomo já tiver muitos elétrons na camada exterior, poderá ganhar mais alguns e completar a camada. Isso tende a acontecer quando a camada está quase cheia, como é o caso dos átomos dos elementos situados à direita da Tabela Periódica, perto do extremo direito de uma linha. Há ainda outra forma de completarem as suas camadas: os átomos podem partilhar elétrons das respetivas camadas exteriores. Isso pode acontecer quando um átomo é relutante em libertar um elétron por completo porque não há qualquer vantagem energética nisso. Esse discreto medíocre, o carbono, forma a maioria das suas extraordinárias ligações desta forma.

Como vimos, os átomos são eletricamente neutros, com a carga negativa total de todos os seus elétrons a igualar e a anular a carga positiva total de todos os prótons no núcleo. Quando um átomo ganha ou perde um elétron, o equilíbrio de cargas é perturbado e o átomo torna-se um ião. Um ião é simplesmente um átomo eletricamente carregado; chama-se assim porque se move em resposta a um campo elétrico, e "ion" é a palavra grega para movimento. Um átomo que tenha ganho um ou mais elétrons fica carregado negativamente e é chamado *anião*. Um que tenha perdido um ou mais elétrons fica carregado positivamente e é chamado *catião* (pronuncia-se "cat ion"). Os prefixos "an" e "cat" vêm das palavras gregas para "acima" e "abaixo", e refletem o facto de que iões de cargas opostas se movem em direções opostas na presença de um campo elétrico. Posso resumir o parágrafo anterior dizendo que os elementos situados à esquerda da Tabela Periódica tendem a perder os poucos elétrons da sua camada exterior e, assim, transformam-se em *catiões*; os que estão à direita, com camadas exteriores quase completas, tendem a ganhar elétrons e, assim, transformam-se em *aniões*.

Acabámos de encontrar um dos grandes mecanismos de ligação: como as cargas opostas se atraem mutuamente, e como catiões e aniões têm cargas opostas, segue-se que os átomos que formam estes iões irão agrupar-se num composto. O sal comum, cloreto de sódio, é um excelente exemplo deste tipo de formação

de compostos. O sódio (Na, do seu nome latino *natrium*) encontra-se à esquerda da tabela e liberta facilmente o seu único eletrão exterior, formando um catião de sódio, representado por  $\text{Na}^+$ . O cloro (Cl) encontra-se à direita da tabela e acolhe de bom grado um eletrão adicional para completar a sua camada exterior, tornando-se assim um anião cloreto,  $\text{Cl}^-$ . (Note a pequena alteração de nome, de chlorine para chloride.) Os iões agrupam-se e formam cloreto de sódio, uma massa sólida e rígida de iões mantidos unidos pela sua atração mútua. Já sublinhei que os átomos são muito pequenos e que até amostras diminutas de uma substância contêm imensos átomos. Você é um Atlas entre estrelas quando se trata de iões, pois ao pegar num grão de sal, está a segurar mais iões do que estrelas existem no universo visível.

Está agora em condições de perceber por que é que o sal extraído de um local ou recolhido de um mar algures tem a mesma composição que outro obtido no lado oposto do mundo. Um átomo de sódio tem um eletrão na sua camada exterior; um átomo de cloro tem uma única vaga na sua. Assim, a única combinação possível é um átomo de sódio ligar-se a um átomo de cloro por este processo de cedência e aquisição de eletrões para se transformarem em iões. Universalmente, o sal comum é  $\text{NaCl}$ , com iões de sódio e cloreto presentes na proporção 1:1. Compostos como  $\text{Na}_2\text{Cl}$  (iões na proporção 2:1) ou  $\text{Na}_2\text{Cl}_3$  (iões na proporção 2:3), e assim por diante, simplesmente não podem existir. Deverá começar a ficar claro que a Natureza tem regras sobre que ligações podem formar-se e quais não podem.

O tipo de ligação que descrevi até agora chama-se *ligação iónica*. Resulta tipicamente em agregados rígidos e quebradiços que só derretem a temperaturas elevadas. O granito e o calcário das nossas paisagens são exemplos de materiais compostos por átomos unidos por ligações iónicas. O facto de não afundarmos ao pisá-los pode ser atribuído ao facto de que as camadas de eletrões em torno dos núcleos dos seus átomos, agora presentes como iões, estão completas, e as nuvens dos nossos átomos não podem ocupar o mesmo espaço que as nuvens dos seus. Os nossos ossos também são largamente iónicos e fornecem uma estrutura razoavelmente rígida para os nossos órgãos.

Os nossos órgãos moles, a nossa carne, o revestimento da carne em tecidos, o revestimento análogo de tecido que a vegetação forma sobre o calcário, o estofado das nossas paisagens — tudo isto é claramente de natureza diferente. Embora possam estar presentes iões, não são eles os responsáveis pelo carácter principal destas estruturas. Aqui estamos no domínio onde os átomos são mantidos unidos por completarem as suas camadas de nuvens ao partilharem eletrões. Este tipo de ligação chama-se *ligação covalente*, sendo o “co” indicativo de cooperação e “valente” derivado da palavra latina para força: *Valete!* era o “Adeus! Sejam fortes!” romano.

Um exemplo simples de ligação covalente é aquele que é responsável pela estrutura da molécula de água, que praticamente toda a gente sabe ser  $\text{H}_2\text{O}$ . O oxigénio, com os seus seis eletrões exteriores, pode acomodar mais dois para completar a sua camada exterior (que pode conter, recorde, um máximo de oito eletrões). Um átomo de hidrogénio pode fornecer um eletrão e completar a sua própria camada exterior (a única que tem) adquirindo mais um eletrão (essa primeira camada mais interna, lembre-se, só pode acomodar dois eletrões). A partilha pode ser completa desde que dois átomos de hidrogénio estejam dispostos a partilhar dois eletrões com o oxigénio: os átomos de hidrogénio ficam cada um com uma parte de dois eletrões e o átomo de oxigénio fica com uma parte de oito eletrões. De imediato vemos que a água não pode ser  $\text{H}_3\text{O}$  nem  $\text{HO}_2$ :  $\text{H}_2\text{O}$  é o único padrão de ligação que resulta em camadas exteriores completas para todos os átomos. A amónia,  $\text{NH}_3$  (onde N designa o azoto), encaixa da mesma forma, porque um átomo de azoto tem cinco eletrões na sua camada exterior e, portanto, precisa de mais três para a completar. Isso é satisfeito pela presença de três átomos de hidrogénio dispostos a partilhar um eletrão cada. O metano,  $\text{CH}_4$ , encaixa também, porque o carbono tem quatro vagas.

Você, tal como os químicos, precisa de estar atento a uma distinção muito importante entre *ligação iónica* e *ligação covalente*. A ligação iónica resulta em enormes agregados de iões: essencialmente blocos de substância. A ligação covalente resulta geralmente em conjuntos atómicos discretos, como  $\text{H}_2\text{O}$ . Ou seja, a ligação covalente origina moléculas individuais. Esta distinção é de

enorme importância e convém tê-la sempre presente. É por esta razão que todos os gases são moleculares, como o oxigénio (moléculas de  $O_2$ ) e o dióxido de carbono (moléculas de  $CO_2$ ); não existe tal coisa como um gás ligado ionicamente! Mesmo que tal gás se formasse, todos os iões se agrupariam imediatamente num sólido. Praticamente todas as substâncias que são líquidas a temperaturas normais são moleculares, pois as moléculas precisam de se poder mover umas em relação às outras e não ficar presas no lugar por uma forte atração aos vizinhos. A água é um exemplo óbvio; a gasolina é outro.

A ligação covalente pode resultar em sólidos, por isso não deve inferir que todos os sólidos são iónicos: todos os compostos iónicos são sólidos a temperaturas comuns, mas nem todos os sólidos são iónicos. Um exemplo de um sólido ligado covalentemente é a sacarose, um composto covalente de carbono, oxigénio e hidrogénio com a composição  $C_{12}H_{22}O_{11}$ , com os átomos em cada molécula ligados entre si por ligações covalentes numa teia intrincada.

Um aspeto de enorme importância na formação de ligações covalentes é a importância absoluta dos pares de eletrões. Um dos maiores químicos do século XX, Gilbert Lewis (1875–1946), identificou essa importância, mas coube à mecânica quântica fornecer a explicação. Para nós, cada par partilhado de eletrões conta como uma ligação covalente, pelo que é fácil contar o número de ligações que qualquer átomo formou simplesmente contando o número de pares de eletrões que partilha. Um par partilhado conta como uma “ligação simples” (representada por  $-$ ), dois pares partilhados entre os mesmos dois átomos contam como uma “ligação dupla” (representada por  $=$ ), e três pares partilhados contam como uma “ligação tripla” (representada por  $\equiv$ ). Raramente a partilha vai além disto e, portanto, estes três tipos de partilha são tudo o que precisamos de conhecer. Cada átomo de hidrogénio em  $H_2O$  está ligado ao átomo de oxigénio por uma ligação simples. O dióxido de carbono é uma molécula com dois conjuntos de ligações duplas, podendo ser representado por  $O=C=O$ . As ligações triplas são muito mais raras, e não voltarei a discuti-las, exceto para mencionar que o gás acetileno utilizado na soldadura oxiacetilénica,  $H-C\equiv C-H$ , é um exemplo.

A questão que espreita por detrás desta explicação é por que é que dois eletrões (um “par eletrónico”) são tão fundamentais para a formação de ligações covalentes. A explicação reside profundamente na mecânica quântica. Uma pista para a razão é que todos os eletrões giram sobre o seu eixo. Se dois eletrões bloquearem os seus spins, girando em direções opostas, podem atingir uma energia mais baixa. Outra manifestação da importância deste bloqueio de spins é o facto de, como vimos, as camadas de nuvens comportarem sempre um número par de eletrões (2, 8, etc.). A expressão francesa para um eletrão não emparelhado, *électron célibataire*, é talvez uma alusão tipicamente gaulesa à importância do emparelhamento.



Até agora, não falei da existência de um terceiro tipo de ligação. A maioria dos elementos são metais: pense em ferro, alumínio, cobre, prata e ouro, e os metais desempenham um papel muito especial na química, como veremos. Um bloco de metal consiste numa lâmina de átomos, mas esses átomos estão ligados por ligações iónicas ou covalentes? De imediato deparamos com um problema. Todos os átomos do bloco são iguais, pelo que é improvável que metade forme catiões e a outra metade aniões, pelo que a ligação iónica é descartada. Se todos os átomos estivessem ligados covalentemente, esperaríamos um sólido rígido (como o diamante, em que os átomos de carbono estão, de facto, assim ligados); mas os metais podem ser moldados em diferentes formas (são “maleáveis”) e esticados em fios (são “dúcteis”). São também lustrosos (refletem a luz) e conduzem correntes elétricas, um fluxo de eletrões.

Os átomos metálicos estão ligados entre si por ligação metálica. Isto não é apenas uma tautologia. A pista sobre a sua natureza é o facto de todos os metais se situarem do lado esquerdo da Tabela Periódica, onde, como vimos, os átomos dos elementos têm apenas alguns eletrões nas camadas mais externas e que são facilmente perdidos. Para conceber a ligação metálica, pense em todos estes eletrões exteriores a desprender-se do átomo de origem e a congregar-se num “mar” que permeia toda a lâmina de átomos. Os catiões que ficam para trás encontram-se neste mar e interagem

favoravelmente com ele. Como resultado, todos os catiões ficam ligados numa massa sólida. Essa massa é maleável porque, tal como um mar real, pode reagir facilmente a um deslocamento na posição dos catiões na massa quando esta é atingida por um martelo. Os elétrons permitem também que o metal seja esticado em fio, respondendo imediatamente à relocação dos catiões. Como os elétrons no mar não estão fixos a átomos específicos, são móveis e podem migrar através do sólido em resposta a um campo elétrico. Os metais são lustrosos porque os elétrons do mar podem reagir à agitação causada pelo campo elétrico de um raio de luz incidente, e essa oscilação do mar gera luz que percebemos como reflexão. Quando olhamos para o revestimento metálico de um espelho, estamos a observar as ondas no mar de elétrons do metal.

A lição de química nesta fase é que os elementos que são metais no seu estado natural são aqueles que podem perder facilmente elétrons das suas camadas exteriores. Estes elementos são, portanto, também aqueles que formam catiões quando há elementos formadores de aniões capazes de aceitar os elétrons descartados. Os elementos situados no extremo direito da Tabela Periódica são captadores de elétrons, pois têm uma ou duas lacunas nas suas camadas exteriores e podem acomodar elétrons provenientes dos átomos que formam catiões. Compostos iônicos (como o cloreto de sódio) formam-se, portanto, tipicamente entre um elemento metálico do lado esquerdo da tabela e um elemento não metálico do lado direito da tabela.

Com este resumo em mente, você começa a pensar como um químico, sendo capaz de antecipar o tipo de composto que uma combinação de elementos provavelmente formará e a prever as suas propriedades. Começa também a compreender como a Tabela Periódica se relaciona com as propriedades dos elementos e dos compostos que formam, e como as relações familiares entre vizinhos, que resultam dos elétrons em nuvem e da repetição periódica de arranjos análogos, se manifestam na prática.

+++

Estes são os princípios centrais da química no que toca às estruturas. Resumem-se à existência de átomos, ao reconhecimento das suas estruturas e ao comportamento dos

eletrões. O próximo ponto de interesse é a “cenoura e o carro” da química: a energia.

## CAPÍTULO 3

---

# SEUS PRINCÍPIOS: ENERGIA E ENTROPIA

---

Nada acontece na química sem que a energia esteja envolvida. Neste capítulo, apresento o papel da energia e como o conceito de entropia constitui a força motriz das transformações químicas.

Os átomos são um grande rio de compreensão em química; o outro rio é constituído pela energia. Para compreender por que e como ocorrem as reações e por que e como se formam ligações de todos os tipos, os químicos pensam nas variações de energia que acontecem quando os processos ocorrem. Os químicos interessam-se também pela energia em si mesma, como quando um combustível é queimado ou quando um alimento, um combustível biológico, é utilizado num organismo. Tal como referi no Capítulo 1, o estudo da energia e das alterações que ela pode sofrer é o mundo da termodinâmica, ao qual nos voltamos agora.

Escrevi extensivamente sobre as leis da termodinâmica<sup>1</sup> e não tenciono repetir aqui a minha discussão. Tal como fiz para a mecânica quântica no Capítulo 2, destilarei a essência do que é necessário e do que os químicos tipicamente mantêm em mente, ou pelo menos no recanto da mente, enquanto realizam o seu trabalho.

A essência da termodinâmica química é que há dois aspetos da energia que é necessário ter presentes: a sua quantidade e a sua qualidade. A Primeira Lei da termodinâmica afirma que a energia total do universo é constante e não pode ser modificada. A energia pode ser distribuída de diferentes formas e convertida de um tipo para outro, mas nenhum processo pode alterar a sua quantidade total. Assim, a Primeira Lei estabelece os limites legais

---

<sup>1</sup> No meu livro "As Quatro Leis que Regem o Universo" (Oxford, 2007); também disponível como "As Leis da Termodinâmica: Uma Breve Introdução" (Oxford, 2010).

da mudança: nenhuma mudança pode ocorrer que altere a quantidade total de energia no universo. A Segunda Lei da termodinâmica afirma que a qualidade da energia degrada-se em qualquer transformação natural. Esta lei exprime-se de modo mais formal através da entropia, uma medida da qualidade da energia no sentido em que, quanto maior a entropia, menor é a sua qualidade, e formula-se como “a entropia do universo tende a aumentar”. Num sentido refinado de “desordem”, a entropia é uma medida da desordem, sendo que maior desordem implica maior entropia. A Segunda Lei pode ser considerada um resumo do poder motor da mudança natural, incluindo as reações químicas, pois só as reações que resultam na degradação da qualidade da energia total do universo podem ocorrer naturalmente. Em suma, tendo em mente o aumento da desordem, as coisas pioram. Um resumo da termodinâmica, o cerne da sua essência, é, portanto, que a Primeira Lei identifica as mudanças possíveis entre todas as mudanças concebíveis (nenhuma alteração na energia total) e a Segunda Lei identifica as mudanças naturais entre essas mudanças possíveis (a entropia deve aumentar).

Os químicos utilizam estes dois conceitos de várias formas. No seu modo convencional de pensar, adotam a visão de que as ligações se formam ou são substituídas por novas ligações ao longo de uma reação se essa reorganização dos átomos resultar numa redução da energia. Essa observação, porém, para um picuinhas como eu, está bastante errada, mas como muitas afirmações falsas, é uma regra prática conveniente e fácil de memorizar. É errada porque a autoridade legal da Primeira Lei a contradiz: a energia total não pode mudar. A explicação correta é que, se um processo, como a formação de uma ligação, liberta energia para o meio envolvente, isso representa uma degradação da energia à medida que ela se espalha e se torna menos disponível: essa libertação aumenta a entropia do universo e, por isso, é um processo natural. O facto de a regra prática “a energia diminui” funcionar na maior parte das vezes deve-se ao facto de que a dispersão da energia libertada conduz a um aumento da entropia. Os químicos práticos utilizam essa regra o tempo todo, e eu seguirei o mesmo caminho. Contudo, manterei os dedos cruzados quando a usar e, interiormente, direi para comigo, um pouco como o apócrifo

sussurro de Galileu, *eppur si muove* (“e, no entanto, move-se”), referido ao movimento da Terra em torno do Sol, que é realmente a entropia a aumentar e não a energia a diminuir.

Forma-se uma ligação entre átomos se (dedos cruzados) isso resultar numa redução de energia. O tipo de ligação que se forma, iónica (atração entre iões) ou covalente (pares de eletrões partilhados), depende de se libertar mais energia com a transferência total de um eletrão de um átomo para outro, produzindo iões, ou com a libertação parcial e posterior partilha. Assim, é possível avaliar se dois elementos formam um composto iónico ou covalente considerando as variações de energia que acompanham os vários tipos de formação de ligações.

O mesmo se aplica à valência característica de um elemento, o número típico de ligações covalentes que pode formar. A valência é outro aspeto da sua personalidade química e da sua relação de parentesco com os seus vizinhos, e está implícita na sua localização na Tabela Periódica. Vimos no Capítulo 2 que o oxigénio, com as suas duas lacunas na camada mais externa de nuvens, pode completar essa camada ao chegar a acordo com dois átomos de hidrogénio para formar  $\text{H}_2\text{O}$ , especificamente  $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ , indicando uma valência de 2. Qualquer ligação adicional de átomos de hidrogénio exigiria que eletrões ocupassem uma nova camada externa de nuvens longe do núcleo, e não haveria qualquer vantagem energética em fazê-lo. Formar menos ligações não permitiria colher a vantagem de formar duas. Assim, com base em critérios energéticos, espera-se que a valência do oxigénio seja 2. Também no Capítulo 2 vimos outro exemplo dessa valência na combinação do oxigénio com o carbono no dióxido de carbono,  $\text{CO}_2$ , especificamente  $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ , onde também apresenta uma valência de 2. Como se vê também neste caso, o carbono exhibe a sua valência típica de 4, tal como o faz no metano,  $\text{CH}_4$ .

Agora podemos ver como a localização de um elemento na Tabela Periódica indica a sua valência característica: a valência típica do carbono é 4, a do seu vizinho azoto é 3, e a do vizinho do azoto, oxigénio, é 2. Algo semelhante pode ser dito dos seus vizinhos na fila inferior: a valência do silício é tipicamente 4, a do fósforo é 3, e a do enxofre é 2. Mais uma vez, vemos como as

considerações energéticas, em colaboração com os conceitos de estrutura atômica — particularmente o preenchimento da estrutura em camadas semelhantes a nuvens — explicam as semelhanças entre elementos vizinhos.



A energia é libertada em muitas reações químicas, como na combustão do gás natural ou da gasolina. O processo não consiste simplesmente na libertação de energia quando se formam ligações, porque os materiais de partida, como o metano, já têm átomos ligados entre si. Em muitas reações, e aqui focar-me-ei na combustão, é necessário quebrar ligações e formar novas ligações. A energia libertada é a diferença entre as duas contribuições. Por exemplo, na combustão do metano, devido à sua reação com o oxigénio,  $O_2$ , as quatro ligações carbono-hidrogénio do metano e as ligações que unem os dois átomos de oxigénio no oxigénio molecular têm de ser completamente rasgadas, o que consome muita energia, antes que se formem novas ligações carbono-oxigénio no dióxido de carbono e ligações hidrogénio-oxigénio na água, o que liberta energia. Só se a energia libertada na formação das novas ligações exceder a energia necessária para a quebra inicial das ligações é que a combustão libertará energia sob a forma de calor. Se o balanço fosse o inverso, queimar metano resultaria em refrigeração!

Os químicos recorrem à termodinâmica para acompanhar estas alterações individuais de energia e para avaliar a variação líquida que ocorre numa reação. Para esse efeito, utilizam uma avaliação da quantidade de energia disponível a partir de uma reação sob a forma de calor, que se designa entalpia. O nome deriva, evocativamente, das palavras gregas para “calor interior”. Existem fundamentos técnicos sólidos para distinguir entalpia de energia, mas, para os nossos propósitos, podemos pensar na entalpia apenas como outro nome para a energia armazenada nos compostos e disponível sob a forma de calor.

Numa chamada reação exotérmica, a energia é libertada sob a forma de calor e a reserva de entalpia diminui. Todas as combustões são exotérmicas, e na combustão do metano a entalpia de metano + oxigénio desce para a entalpia de dióxido de carbono

+ água, escapando a diferença sob a forma de calor. Os químicos avaliam a eficiência dos combustíveis considerando as variações de entalpia que acompanham a sua combustão, sendo preferidos os reservatórios cheios de entalpia, pois disponibilizam mais calor a partir de uma dada quantidade de combustível. O estudo da entalpia e da libertação de calor em reações químicas designa-se termoquímica. Ele dá um contributo substancial para a nossa compreensão dos alimentos e dos combustíveis, sendo também utilizado para recolher dados para discussões termodinâmicas mais gerais.

A maioria das reações, não apenas as combustões, é exotérmica, com os materiais de partida a colapsarem nos produtos de menor entalpia da reação e, assim, a atingirem uma entalpia global inferior. É talvez fácil compreender que muitas reações decorrem no sentido de menor entalpia, tal como sugere a regra prática (dedos cruzados) relativa à energia. No entanto, surge aqui um enigma que deixou os químicos do século XIX completamente perplexos: algumas reações sobem naturalmente em entalpia. As reações que absorvem calor e aumentam a sua reserva de entalpia chamam-se reações endotérmicas. Não existem muitas reações comuns que ocorram naturalmente, mas o facto de existir sequer uma bastou para erguer as sobrancelhas perplexas dos químicos do século XIX, pois perguntavam-se como poderia algo avançar naturalmente ladeira acima — neste caso, ladeira acima na entalpia.

Eles não sabiam sobre a entropia, e interpretavam literalmente a regra prática segundo a qual as coisas caem naturalmente para níveis de energia mais baixos. Os químicos sabem agora que é a entropia que determina a direção das reações e que, desde que a entropia aumente, a reação pode avançar quer a subir, quer a descer em entalpia. Para compreender porquê, temos de recordar que a entropia é uma medida da qualidade da energia.

Quando a energia se espalha para o meio envolvente de um balão de reação e se dispersa, a entropia aumenta, pelo que deveria ser fácil compreender por que razão as reações exotérmicas são tão comuns. Contudo, precisamos de pensar no que está a acontecer dentro do balão. Suponhamos que, no decorrer de uma reação, a energia flui para dentro do balão: a entropia diminui, porque agora

a energia está localizada, menos dispersa e mais facilmente disponível; tornou-se de maior qualidade. Suponhamos, porém, que ao mesmo tempo se gera uma grande desordem dentro do balão. Agora a entropia total do universo pode aumentar apesar de a energia se tornar mais localizada. Se isso acontecer, então a reação endotérmica ocorrerá naturalmente.

O erro dos químicos do século XIX foi supor que, como a maçã de Newton, as reações rolavam para baixo em entalpia; aquilo que os químicos do século XXI sabem é que as reações rolam para cima em entropia: a desordem aumenta; as coisas pioram. Muitas vezes, ambas conduzem à mesma conclusão, mas em todos os casos é a entropia a propriedade a considerar. O aumento da entropia é o marco indicador da mudança e, por vezes, aponta numa direção endotérmica. Se continuar a querer pensar, partindo da sua familiaridade com a gravidade, que a direção natural da mudança é “para baixo”, então pense que a mudança natural é invariavelmente para baixo na qualidade da energia.

Agora sabemos para onde uma reação se dirige: o sinal das transformações naturais aponta para uma entropia mais elevada do universo, a degradação da energia. Existem duas questões associadas. Uma é a rapidez com que segue para onde quer que vá, e a segunda é o percurso que escolhe para lá chegar. Irei tratar da primeira questão aqui e abordar a segunda no Capítulo 4.

Os químicos interessam-se profundamente pelas velocidades das reações químicas, pois de pouco serve saber que, em princípio, podem gerar uma substância numa reação se essa operação levar milénios para produzir um miligrama. O estudo das velocidades das reações chama-se cinética química. Veremos que a energia é um elemento crucial na explicação da ampla variedade de velocidades observadas. Essa variedade é realmente muito grande: algumas reações ficam concluídas em frações de segundo (pense em explosões); outras demoram anos (pense em corrosão).

Os químicos medem as velocidades de reação de forma simples, monitorizando a variação da quantidade de um produto ao longo do tempo. Fazem estas medições por várias razões. Uma, a mais básica, é simplesmente saber que concentração esperar em cada momento. Mais significativamente, sobretudo em aplicações

industriais, podem querer determinar as condições que permitem formar produtos à velocidade ideal. Uma terceira razão consiste em descobrir o chamado mecanismo da reação, a sequência de alterações ao nível atómico que converte os materiais iniciais, os “reagentes”, no produto final. Informações muito detalhadas deste último tipo são obtidas disparando um feixe de moléculas contra outro e monitorizando o resultado das colisões que ocorrem.

A minha preocupação aqui é o papel da energia na determinação da velocidade de uma reação. Já vimos que pode existir uma tendência natural para que uma reação ocorra, por isso surge a questão de saber por que é que todas as reações não terminam num instante. Esta questão é de importância suprema, pois o desenvolvimento lento e controlado dos produtos permite, em muitos casos, as subtilezas operacionais que constituem a vida: se as reações biológicas acontecessem todas num relâmpago seríamos imediatamente reduzidos a uma pasta informe.

Os químicos identificaram a existência de uma barreira à reação instantânea. Ao medir o efeito da temperatura sobre as velocidades de reação, reconheceram que as moléculas precisam de adquirir pelo menos uma energia mínima, chamada energia de ativação, antes de os átomos dos reagentes conseguirem reorganizar-se em produtos. Esta exigência é mais fácil de compreender nas reações que ocorrem em gases, onde as moléculas colidem incessantemente umas com as outras com diferentes energias de impacto. Só impactos altamente energéticos entre moléculas realmente rápidas fornecem energia suficiente para afrouxar as ligações que mantêm os átomos nas suas disposições iniciais, permitindo-lhes reorganizar-se em novas estruturas. À medida que a temperatura aumenta, as moléculas movem-se mais depressa e uma maior proporção das colisões ocorre com pelo menos essa energia mínima, pelo que a velocidade da reação aumenta. Algumas barreiras de ativação são muito elevadas e quase nenhuma colisão é suficientemente energética para produzir reação a temperaturas normais. O exemplo clássico é a reação entre hidrogénio e oxigénio: os dois gases podem ser armazenados juntos indefinidamente a temperaturas normais, mas explodem a altas temperaturas ou quando uma faísca fornece localmente energia suficiente para desencadear a reação.

Exige-se, de modo semelhante, uma energia mínima para reações em solução, incluindo as que ocorrem nos meios aquosos interiores dos seres vivos. Neste ambiente, as moléculas não atravessam o espaço em trajetórias rápidas e retilíneas para colidir: deslocam-se empurradas pelo fluido, encontram-se e podem afastar-se sem alteração. Contudo, existe a possibilidade de que, quando duas moléculas reagentes se encontram, sejam empurradas com tal violência pelas moléculas de água circundantes que os seus átomos se separem o bastante para se reorganizarem em produtos. A probabilidade de ocorrer um empurrão suficientemente violento aumenta acentuadamente com o aumento da temperatura, pelo que mesmo as reações em meios fluidos aceleram quando aquecidas. Os pirilampos, por exemplo, piscam mais rapidamente em noites quentes do que em noites frias; e aquecemos os alimentos para induzir as reações culinárias que chamamos “cozinhar”.

Em muitos casos, é possível acelerar uma reação introduzindo um catalisador, uma substância que aumenta a velocidade da reação, mas permanece inalterada. Os caracteres chineses para catalisador formam a expressão “casamenteiro”, que capta muito bem o sentido da sua função. Um catalisador atua fornecendo um percurso diferente — uma sequência distinta de migrações de átomos e formações de ligações — para a reação, um percurso com uma barreira de ativação mais baixa. Como a energia de ativação é menor, ocorrem mais encontros bem-sucedidos entre reagentes a temperaturas comuns e a reação torna-se mais rápida. Os catalisadores são o sangue vital da indústria química, onde a produção eficiente e rápida de substâncias desejadas é essencial e o sucesso de toda uma indústria depende da identificação do catalisador adequado. Importa notar que não existe algo como um “catalisador universal”: cada reação tem de ser estudada individualmente e é necessário desenvolver um catalisador apropriado. Outro ponto é que nem todas as reações podem ser catalisadas: em muitos casos temos de aceitar a decisão da Natureza quanto à velocidade.

Os catalisadores são essenciais para o funcionamento do nosso organismo. As enzimas (uma palavra derivada do termo grego *zyme*, “fermentar”) são moléculas proteicas que atuam como catalisadores e controlam, com grande especificidade e eficácia, praticamente todas as reações químicas que ocorrem dentro de nós. A vida é a própria expressão da catálise.



Um aspeto muito importante das velocidades de reação diz respeito ao que está a acontecer quando uma reação terminou e a mudança deixou de ser aparente. Os químicos dizem que a reação atingiu o equilíbrio. Em muitos casos, resta apenas uma única molécula do material de partida, mas noutros a reação parece parar antes de todos os materiais iniciais terem sido consumidos. Um exemplo deste último caso é a reação, de enorme importância económica, entre azoto e hidrogénio para a síntese de amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) no “processo Haber–Bosch”, que está na origem de processos que incluem a produção de grande parte dos fertilizantes agrícolas do mundo. Essa reação parece chegar a uma paragem teimosa com apenas uma pequena fração do azoto e do hidrogénio convertidos em amoníaco, e, por mais que esperemos ou por mais catalisador que adicionemos, nenhuma alteração adicional ocorre. A reação atingiu o equilíbrio.

O equilíbrio é apenas uma cessação aparente da reação. Se pudéssemos monitorizar uma mistura em equilíbrio ao nível atómico, verificaríamos que continua a ser um turbilhão de atividade química. Os produtos continuam a formar-se quando uma reação está em equilíbrio, mas degradam-se de volta aos materiais de partida à mesma velocidade. Ou seja, o equilíbrio químico é um equilíbrio dinâmico, no qual os processos direto e inverso ocorrem a velocidades iguais, de tal modo que não há mudança líquida. Na síntese de amoníaco, as moléculas formam-se continuamente no equilíbrio, mas são desfeitas em azoto e hidrogénio à mesma velocidade a que se formam, sem alteração líquida.

A consequência importante de o equilíbrio químico ser dinâmico e não apenas inerte é que permanece sensível a alterações nas condições. Assim, mesmo que certas reações dentro do nosso corpo tenham atingido o equilíbrio, continuam a responder

a mudanças de temperatura e outros fatores, e é essa capacidade de resposta que nos mantém vivos. A “homeostase”, o equilíbrio delicado e complexo que mantém os organismos vivos e atentos, é uma manifestação deste equilíbrio químico dinâmico e responsivo.

Quanto à síntese de amoníaco, vital para a indústria, o facto de o equilíbrio ser dinâmico e não inerte dá aos químicos e à indústria a esperança de que talvez possam manipular esse equilíbrio e melhorar o rendimento de amoníaco. Essa foi a perspectiva que se colocou ao químico Fritz Haber (1868–1934) e ao engenheiro químico Carl Bosch (1874–1940) no início do século XX, que acabaram por descobrir que, com uma escolha astuta de catalisador e trabalhando a altas pressões e temperaturas, podiam dobrar o equilíbrio à sua vontade. Ao fazê-lo, alimentaram o mundo.

+++

Vimos agora que a energia é simultaneamente a cenoura e a carroça das reações químicas, e podemos finalmente desvendar o significado da minha observação délfica no final do Capítulo 2. A energia, a sua dispersão na desordem, é a cenoura: a força motriz das reações químicas. A energia, a necessidade de ultrapassar as barreiras entre reagentes e produtos, é também a carroça, no sentido de conter o voo livre e irrestrito em direção à cenoura.

Quase nada disse sobre a forma como os reagentes realizam efetivamente a reorganização atômica que conduz aos produtos. Desvendar e compreender essas transformações, e utilizá-las para produzir mudanças espantosas e quase mágicas, está no coração da química prática, e constitui o próximo passo da nossa viagem.

## CAPÍTULO 4

---

### AS SUAS REAÇÕES

---

A essência da química é a transformação de uma combinação de átomos noutra através de reações, e aqui introduzo algumas características destes processos. Mostro que existem apenas quatro tipos fundamentais de reação, cada um dos quais envolve um tipo muito simples de alteração. Depois, demonstro como essas reações fundamentais são combinadas e utilizadas pelos químicos para construir estruturas de grande complexidade.

**S**empre que alguém pensa em química, pensa nas suas reações, reações que faíscam, estalam, mudam de cor ou tresandam. Têm consciência de que ocorrem reações em unidades industriais, de que a combustão de um combustível e a produção de plástico, tinta ou fármacos são reações. Talvez alguns pensem corretamente na culinária como um processo que provoca reações, e a maioria está provavelmente, pelo menos, vagamente consciente de que nós próprios somos tubos de ensaio elaborados, vivos graças à miríade de reações que ocorrem dentro de nós. Mas o que são exatamente as reações? O que acontece quando os químicos agitam e fervem as suas misturas líquidas, vertem um líquido noutro e, de um modo geral, se entregam às suas atividades aparentemente arcanas nos laboratórios?

Estão a persuadir átomos a trocar de parceiros. A substância de partida, os “reagentes”, consiste em átomos numa certa forma de combinação; a substância produzida, os “produtos”, consiste nos mesmos átomos, mas numa forma diferente de combinação. O agitar, mexer e ferver serve para provocar essa passagem de um estado de combinação para outro, forçando a separação de átomos num tipo de molécula e estimulando-os a formar tipos diferentes de moléculas. Nalguns casos, os átomos dos reagentes caem imediatamente na nova disposição pretendida, enquanto noutros o químico tem de planejar e seduzir, concebendo hábeis persuasões ao longo de uma sequência de passos subtis. A combustão e a explosão podem resultar de uma faísca; para gerar uma molécula

farmacêutica intrincada e ramificada pode ser preciso pensamento, sorte, tempo e um planejamento cuidadoso, sofisticado e erudito.

Um laboratório químico está repleto de equipamento especializado, grande parte do qual serve para determinar se o produto de uma reação corresponde ao que o químico espera ou imagina ser. Explico algumas das suas funções no Capítulo 5. Grande parte do equipamento está diretamente envolvida no processo de persuadir átomos e separar o trigo químico do joio, o produto desejado dos resíduos. Há tubos de ensaio, frascos, béqueres, aparelhos de destilação, aparelhos de filtração e vários aquecedores, agitadores e mexedores. Apesar deste conjunto desconcertante (e dispendioso) de aparelhos, através dos olhos de um químico existe apenas um pequeno número de processos a ocorrer ao nível atômico: quatro, para ser preciso. Vale realmente a pena deter-nos nesta afirmação e perceber que todas as maravilhas do mundo, naturais e sintéticas, são tecidas a partir de um punhado de elementos e de quatro formas de os manipular.

No restante deste capítulo apresentar-lhe-ei esses quatro tipos fundamentais de reação. Nalguns casos, conspiram entre si e a sua colaboração parece, à primeira vista, constituir um novo tipo de reação, mas quando essa conspiração é analisada, lá estão elas<sup>1</sup>.



Os químicos descobriram a partícula fundamental conhecida como “protão” muito antes de os físicos a terem identificado com precisão, mas os químicos não se aperceberam de que o tinham feito. Um protão, lembre-se do Capítulo 2, é o minúsculo núcleo, com carga simples, de um átomo de hidrogénio. A sua baixa carga (o que significa que, muitas vezes, é apenas tenuemente agarrado por um átomo vizinho numa molécula) e a sua baixa massa (que o torna ágil) fazem com que um átomo de hidrogénio que integra uma molécula possa, de repente, descobrir que o seu núcleo, o protão, deslizou para fora e ficou embebido nas nuvens de eletrões de uma molécula vizinha mais acolhedora. Isso — a transferência de um

---

<sup>1</sup> A minha obra “My Reactions: The Private Life of Atoms” (Oxford, 2011) aborda estas questões de forma mais ilustrativa e detalhada.

protão de uma molécula para outra — é, em poucas palavras, um dos quatro grandes tipos fundamentais de reação.

Entramos no mundo dos ácidos e das bases. Embora os primeiros químicos estivessem familiarizados com os ácidos, demoraram muito tempo a perceber que um ácido é um composto com átomos de hidrogénio que exercem pouco controlo sobre os seus núcleos e tendem a perdê-los. Os ácidos eram, em tempos, reconhecidos, como o nome sugere (do latim *acidus*: azedo, agre), pelo seu sabor picante. Os químicos que sobreviviam a esse teste perigoso (hoje presente de forma mais agradável na nossa reação ao travo do vinagre, da soda ou das bebidas de cola) não faziam ideia de que aquilo que lhes estimulava as papilas gustativas eram protões. Esse reconhecimento só surgiu tão tarde como em 1923, quando o químico britânico Thomas Lowry (1874–1936) e o químico dinamarquês Johannes Brønsted (1879–1947) propuseram, de forma independente, que um ácido é qualquer molécula ou ião que contenha átomos de hidrogénio capazes de libertar o seu núcleo protónico para outra molécula ou ião. Nem todas as moléculas que contêm hidrogénio conseguem agir desta forma, pois o protão pode estar demasiado profundamente embebido nas nuvens de eletrões, mas diversas classes de moléculas conseguem fazê-lo, sobretudo se outros átomos na molécula forem capazes de puxar a nuvem eletrónica para longe do protão e permitir-lhe escapar. O ácido acético, o ácido do vinagre, é um desses compostos; outros incluem o ácido clorídrico (HCl) e o ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>). Se alguma vez vir o H escrito primeiro numa fórmula, isso indica que pode libertar o seu protão e atuar como ácido. (E quanto à H<sub>2</sub>O?, poderá estar a pensar: espere e verá.)

Uma mão não pode bater palmas sozinha. Se existe um dador de protões (um ácido), presume-se que deve existir um aceptor de protões, uma molécula ou ião ao qual o protão libertado possa aderir e no qual se possa alojar na nuvem de eletrões. É aqui que entram as bases (o nome “álcali” vem do árabe *al qaliy*, as cinzas, pois a cinza de madeira é uma fonte de álcalis).

O teste para um álcali costumava ser tão arriscado quanto o teste para um ácido: neste caso, um álcali tem um toque escorregadio, semelhante ao sabão. Hoje sabemos que os álcalis

transformam gorduras em sabões, por isso, durante o teste, as gorduras no dedo do experimentador estavam a ser transformadas em sabão. Escusado será dizer que os químicos têm agora testes mais sofisticados e que permitem melhor sobrevivência. A razão subjacente à capacidade dos álcalis de transformar gorduras em sabão é a presença neles de iões hidróxido,  $\text{OH}^-$ , espécies capazes de atrair e reter protões, tornando-se, no processo, moléculas de água,  $\text{H}_2\text{O}$ .

Aqui está um pequeno ponto técnico que preciso mesmo de introduzir. Os químicos referem-se hoje a uma molécula ou ião que aceite protões como uma "base". Assim, o  $\text{OH}^-$  é uma base. Mantêm o termo "álcali" para bases dissolvidas em água. Portanto, por exemplo, o hidróxido de sódio,  $\text{NaOH}$ , dissolve-se em água, separando-se em iões  $\text{Na}^+$  e iões  $\text{OH}^-$ . É, portanto, uma fonte da base  $\text{OH}^-$  e a solução é um álcali. Usarei o termo "base" daqui em diante, porque é mais geral do que álcali (uma molécula ou ião não precisa de estar presente em água para ser uma base).

Porquê o nome "base"? Quando o ácido clorídrico reage com uma solução de hidróxido de sódio, formam-se sal (cloreto de sódio) e água quando o protão do ácido salta para o ião  $\text{OH}^-$  fornecido pelo hidróxido de sódio. Quando o ácido sulfúrico reage com uma solução de hidróxido de sódio, formam-se sulfato de sódio e água quando o protão do ácido salta para o ião  $\text{OH}^-$  fornecido pelo hidróxido de sódio. Estamos a construir compostos diferentes, cloreto de sódio e sulfato de sódio, sobre os alicerces da mesma base, o hidróxido de sódio: daí o nome. Aliás, tanto o cloreto de sódio como o sulfato de sódio são chamados "sais", a classe geral dessas substâncias iónicas formadas pela reação de um ácido com uma base, tomando o seu nome de um exemplo comum, o sal comum, o cloreto de sódio. Esse é um traço habitual na química: o nome de um tipo de composto inspira o nome de toda uma classe relacionada.

Um grande número de reações são reações entre ácidos e bases, cuja característica comum é a transferência de um protão do ácido para a base. Entre as mais importantes contam-se as reações que ocorrem dentro dos organismos, incluindo milho, carvalhos, moscas, rãs e nós próprios, pois muitas reações bioquímicas controladas por enzimas, como as envolvidas no metabolismo dos

alimentos e na respiração, são deste tipo. Na verdade, pode considerar a vida como uma longa e altamente elaborada titulação!

Uma das razões da importância das reações ácido-base baseadas na transferência de prótons é que a presença do próton recém-chegado, com a sua carga positiva, distorce a nuvem eletrônica da base, talvez expondo um átomo próximo na molécula a ataques de outros átomos quando a nuvem eletrônica em redor é puxada para longe. Assim, a transferência de prótons prepara átomos — e as ligações que os mantêm unidos — para ataques e para novas reações. Esta preparação para o ataque é uma das funções principais das reações ácido-base no nosso corpo, com as enzimas a prepararem moléculas mais pequenas para digestão ou modificação.

Suspeitei anteriormente que poderia preocupar-se com a água e a sua fórmula  $\text{H}_2\text{O}$ , que, com os seus átomos de H na dianteira, poderia sugerir que é um ácido. É. Quando bebe água, está a beber quase 100 por cento de ácido. A água é também uma base. Deve saber que, ao beber água, está a beber quase 100 por cento de base pura. Preciso de explicar esta revelação alarmante. Embora pareça inquietante, aceitar o facto de que a água é simultaneamente um ácido e uma base é essencial para a forma como os químicos pensam nela, nas soluções que forma e nas reações que realiza.

Imagine-se como uma molécula de água num copo de água, rodeada por outras moléculas de água numa multidão densa e em constante atropelo. O próton de um dos seus átomos de hidrogénio pode escapar-lhe e aderir a um vizinho. Essa transferência implica que, sendo dadora de prótons, se comporta como um ácido. O seu vizinho, que aceitou o próton, está a comportar-se como uma base. A perda de um próton deixa-lhe como um ião  $\text{OH}^-$ , um ião hidróxido; o ganho de um próton transforma o seu vizinho num ião  $\text{H}_3\text{O}^+$ , chamado ião hidrónio. O próton que chega é como uma batata quente, e passa imediatamente para um dos vizinhos do seu vizinho. Do mesmo modo, a sua carga negativa pode arrancar um próton a um dos seus vizinhos, devolvendo-lhe ao estado de  $\text{H}_2\text{O}$ . Esta agitação incessante, com o próton a ser passado adiante e as moléculas a oscilarem entre  $\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{H}_3\text{O}^+$ , ocorre em todo o

líquido. As concentrações reais dos iões  $\text{OH}^-$  e  $\text{H}_3\text{O}^+$  são muito, muito pequenas, por isso, quando olha para um copo de água, deve imaginá-lo como quase totalmente composto de moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$ , mas com apenas alguns iões  $\text{OH}^-$  e  $\text{H}_3\text{O}^+$  dispersos, cujas identidades mudam incessantemente enquanto os protões saltam de umas para outras. Cada molécula de  $\text{H}_2\text{O}$ , contudo, é um ácido (um dador de protões) e cada molécula de  $\text{H}_2\text{O}$  é uma base; é por isso que afirmei que a água é um ácido quase puro e uma base quase pura.

+++

O eletrão foi descoberto pelo físico J. J. Thomson em 1897. Os químicos tinham-no deslocado inadvertidamente durante décadas antes disso, com Michael Faraday (1791–1867) como o seu grande deslocador: claramente, nem ele sabia o que estava a fazer. A transferência de um eletrão de uma molécula para outra é a segunda das quatro grandes reações fundamentais, e muito deriva da migração desta pequena partícula elementar. A transferência de eletrões, por exemplo, está na base de grandes indústrias, como a siderurgia. É também responsável pelo colapso dos seus artefactos através da corrosão.

Preciso de lhe apresentar os termos oxidação e redução, e depois explicar como a transferência de eletrões desempenha um papel neles. Oxidação soa como se significasse exatamente o que diz: reação com oxigénio. Contudo, embora na ciência um termo possa ter começado na linguagem comum, muitas vezes acaba por captar uma área mais vasta ao ser generalizado. Vimos isso há pouco na generalização do termo sal, de um único exemplo para uma classe inteira de compostos relacionados. O mesmo acontece com oxidação.

Tomemos um exemplo simples. A maioria de nós já viu a luz intensa emitida quando uma tira de magnésio ( $\text{Mg}$ ) arde no ar. Nesta reação, o magnésio metálico combina-se com o oxigénio para formar óxido de magnésio, um sólido iónico constituído por iões  $\text{Mg}^{2+}$  e iões  $\text{O}^{2-}$ . A energia libertada na reação é emitida sob a forma de luz e calor. O ponto crucial a notar, porém, é que cada átomo de  $\text{Mg}$  do metal perdeu dois eletrões e tornou-se um ião  $\text{Mg}^{2+}$  com carga dupla. Uma reação semelhante, embora muito menos

familiar, ocorre quando o magnésio arde em cloro gasoso, produzindo cloreto de magnésio. Esse composto é constituído por iões  $\text{Mg}^{2+}$  e iões  $\text{Cl}^-$ . Tal como na primeira reação, a alteração essencial é que cada átomo de Mg perdeu dois eletrões para se tornar um ião  $\text{Mg}^{2+}$ . Não há oxigénio envolvido na segunda reação, mas ocorre o mesmo processo: a remoção de eletrões. Os químicos consideram agora a segunda reação simplesmente como uma oxidação de tipo geral e definem oxidação como a perda de eletrões. Por vezes é bastante difícil identificar a perda de eletrões, como na combustão de um combustível hidrocarboneto, mas eles têm formas de o fazer e, sempre que ocorre perda de eletrões, chamam-lhe oxidação, mesmo que o oxigénio não esteja envolvido de forma alguma.

Vimos, ao discutir as reações entre ácidos e bases, que uma mão não pode bater sozinha: se há um dador de protões (o ácido), tem de haver um recetor de protões (a base). Uma mão também não pode bater sozinha numa reação de transferência de eletrões, e os eletrões perdidos numa oxidação têm de acabar nalgum lado. É aí que entra a redução.

Antigamente (estou a ser deliberadamente vago), redução referia-se à extração de um metal a partir do seu minério: o minério era reduzido ao metal. Este processo ocorria, por exemplo, naquele enorme ícone da revolução industrial, o alto-forno, onde o minério de ferro (um óxido de ferro) reage com carbono e monóxido de carbono para formar o ferro fundido (Fe, do latim *ferrum*) que escorria pela base do forno e seguia depois para um futuro como várias espécies de aço. O óxido de ferro consiste em iões  $\text{Fe}^{3+}$  e iões  $\text{O}^{2-}$ . O ferro metálico consiste em átomos de Fe. Com isto em mente, é fácil ver o que aconteceu na redução do minério: eletrões ligaram-se a cada ião  $\text{Fe}^{3+}$  para neutralizar a sua carga e formar átomos de Fe.

A ligação de eletrões a um átomo é agora tomada como definição de redução, mesmo que a reação nada tenha (para além desse aspeto) a ver com a redução de um minério a metal. Assim, na combustão do magnésio em oxigénio, as moléculas de oxigénio recebem os eletrões libertados na oxidação do magnésio e tornam-se iões  $\text{O}^{2-}$ : o oxigénio é reduzido. Na oxidação do magnésio pelo

cloro, as moléculas de cloro recebem os eletrões libertados e tornam-se iões  $\text{Cl}^-$ : o cloro é reduzido. Sempre que eletrões libertados são transferidos para um átomo, diz-se que esse átomo é reduzido.

Agora temos ambas as mãos a bater numa reação de transferência de eletrões: oxidação (perda de eletrões) ocorre sempre com redução (ganho de eletrões). Os químicos reconhecem a necessidade destas duas mãos e referem-se não a uma reação de oxidação isolada, nem a uma reação de redução isolada, mas a uma reação redox. (Não estendem, até agora, essa forma comprimida de nomear as reações ácido-base num único termo.)

As reações redox são de enorme importância. Já vimos que estão na origem da cadeia siderúrgica, quando o ferro é extraído dos seus minérios. O inverso dessa extração é o processo de corrosão, quando os artefactos de ferro se perdem nas reações redox que chamamos corrosão: quando o ferro é oxidado pela água e pelo oxigénio do ar e volta ao seu óxido. As reações de combustão que movem os nossos veículos são reações redox, nas quais o combustível hidrocarboneto é oxidado a dióxido de carbono e água pela reação com o oxigénio (que é reduzido).

As reações que ocorrem nas baterias que alimentam os nossos computadores portáteis, tablets, telemóveis e, cada vez mais, veículos são reações redox. As baterias são tão importantes para o mundo moderno como fontes portáteis de corrente elétrica que vale a pena perceber o princípio geral do seu funcionamento e como aproveitam reações redox.

Vimos que numa oxidação são libertados eletrões e que numa redução eles são adquiridos. Numa bateria, a libertação e a aquisição são separadas espacialmente. Os eletrões são libertados para um elétrodo, um contato metálico, numa região da bateria, percorrem um circuito externo e depois ligam-se às espécies que sofrem redução num segundo elétrodo noutra parte da bateria. Assim, a reação redox — o par de reações de oxidação e redução — avança e, ao fazê-lo, o fluxo de eletrões de um elétrodo para o outro é utilizado para alimentar qualquer equipamento elétrico ligado ao dispositivo. As baterias modernas recorrem a uma variedade de reações redox para gerar este fluxo de eletrões, desde

as pesadas baterias de chumbo-ácido em veículos até às leves baterias de íons de lítio em computadores portáteis, tablets e telemóveis.

As reações redox também podem ser forçadas a decorrer no sentido contrário ao natural, injetando eletrões numa mistura reativa através de um eletrodo. Este é o processo de eletrólise, o processo de provocar uma reação química pela passagem de uma corrente elétrica. A eletrólise é o método principal de extração de alumínio (Al) a partir do óxido de alumínio. Uma corrente poderosa é forçada para dentro de uma célula contendo óxido de alumínio dissolvido num solvente especial, e os eletrões que entram na célula são forçados a ligar-se aos íons  $\text{Al}^{3+}$ , formando átomos de Al. A eletrólise também é usada para purificar cobre e para depositar metais, como o cromo, sobre a superfície de outros metais.

Uma característica que distingue a transferência de eletrões nas reações redox da transferência de prótons nas reações ácido-base é que, como os eletrões estão intimamente envolvidos na ligação química, a migração de um eletrão de uma molécula para outra pode arrastar consigo vários outros átomos. Já vimos um pouco disso, sem o destacar, nas reações de combustão, em que, no decurso da oxidação de uma molécula hidrocarboneto, átomos de carbono, oxigénio e hidrogénio são arrastados enquanto os eletrões migram entre as moléculas, e as moléculas de hidrocarboneto e de oxigénio são reorganizadas em moléculas de dióxido de carbono e água. Esta diferença é de enorme importância nas reações da química orgânica, onde o uso engenhoso de reações redox com arraste de átomos permite construir estruturas intrincadas.

É em parte devido a esta capacidade dos eletrões migrantes de arrastar bagagem atómica que as reações redox são tão importantes na biologia: mantêm a biosfera (incluindo aquela pequena parte, você) viva e vibrante. A fotossíntese, o processo pelo qual a luz solar é captada e usada para alimentar a formação de hidratos de carbono nas plantas verdes, é uma cadeia de reações de transferência de eletrões que tem o efeito global, quando se considera o arraste de átomos, de usar os átomos de hidrogénio da água e os átomos de carbono e oxigénio do dióxido de carbono para

construir hidratos de carbono, incluindo amido e celulose. Na forma de corrosão orgânica a que chamamos digestão, esses hidratos de carbono formados por processos redox são explorados pelos seus átomos de carbono e hidrogénio numa sequência de reações redox que chamamos respiração e metabolismo.



A terceira espécie de reação ocorre quando radicais se encontram. Precisa de saber que um radical (ou radical livre) é uma molécula com um número ímpar de eletrões. Vimos que os eletrões se emparelhavam quando se formavam ligações, pelo que um radical é uma molécula em que todos os eletrões, exceto um, se emparelharam e mantêm os átomos unidos, restando um eletrão desemparelhado. Um radical é geralmente representado por  $R\cdot$  ou  $\cdot R$ , sendo o ponto o símbolo do eletrão desemparelhado.

A maioria dos radicais é agressivamente reativa e não sobrevive muito tempo em estado selvagem. Em alguns casos, dois radicais podem colidir e agrupar-se, à medida que os seus eletrões desemparelhados se emparelham e ligam os dois radicais para formar uma molécula convencional com um número par de eletrões:  $R\cdot + \cdot R \rightarrow R-R$ . Este tipo de processo ocorre em chamas, que são ambientes ricos em radicais porque o stress das altas temperaturas desfaz as moléculas, rompendo as ligações formadas por pares de eletrões. Na verdade, um tipo de retardador de chama é uma substância que origina radicais quando aquecida. Estes radicais, vamos representá-los por  $\cdot X$ , ligam-se aos radicais que propagam a chama e extinguem a sua agressividade química,  $R\cdot + \cdot X \rightarrow R-X$ , fazendo com que a chama se dissipe.

Outros radicais têm grande importância comercial, pois estão envolvidos na formação de muitos plásticos. A ideia geral por detrás deste processo, chamado polimerização, é que, quando um radical  $R\cdot$  ataca uma molécula comum  $M$ , pode ligar-se a ela. Contudo, o resultado continua a ser uma molécula, agora  $RM\cdot$ , com um número ímpar de eletrões, pelo que também é um radical. Esse radical pode continuar a atacar outra molécula  $M$  e a ligar-se a ela. O resultado continua a ser um radical, agora  $RMM\cdot$ . Por outras palavras, pode ocorrer uma reação em cadeia, uma sequência de processos que se propaga indefinidamente, produzindo um longo radical

serpenteante  $\text{RMM}\dots\text{M}\cdot$ , ou até que dois desses radicais colidam, se unam pelo emparelhamento de eletrões e, assim, terminem a cadeia.

Os plásticos ubíquos polietileno, poliestireno e PVC (policloreto de vinilo) são produzidos desta forma. No caso do polietileno, a molécula  $\text{M}$ , chamada monómero neste contexto, é o etileno,  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ . O resultado da polimerização é uma longa cadeia, um polímero, composta por centenas de unidades  $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ . Os químicos descobriram que, começando com diferentes versões do etileno, como  $\text{H}_2\text{C}=\text{CHX}$ , onde  $\text{X}$  pode ser um grupo de átomos, conseguem formar polímeros com uma vasta gama de propriedades. Assim, quando  $\text{X}$  é um anel benzénico, o polímero é o poliestireno, e quando  $\text{X}$  é um átomo de cloro o polímero é o PVC. Para obter o Teflon® antiaderente, todos os átomos de hidrogénio são substituídos por átomos de flúor; é por isso que o seu nome mais formal é politetrafluoroetileno (PTFE).

+++

A quarta e última espécie de reação fundamental pode parecer obscura à primeira vista, mas é um processo de enorme importância. Vimos há pouco que dois radicais podem formar uma ligação entre si se cada um trouxer um eletrão, que então se emparelham. Neste tipo final de reação, uma das moléculas fornece ambos os eletrões da ligação que se forma entre elas, cabendo ao outro interveniente acomodar os dois eletrões. Podemos representar este tipo de reação por  $\text{A} + :\text{B} \rightarrow \text{A}-\text{B}$ , sendo o duplo ponto em  $\text{B}$  o par de eletrões que está a caminho de ser partilhado com  $\text{A}$ . As reações deste género chamam-se reações ácido-base de Lewis, em homenagem ao químico norte-americano G. N. Lewis, que as identificou e mais tarde morreu devido a elas. (Faleceu após ingerir iões cianeto,  $\text{CN}^-$ , um veneno que atua mediante este tipo de reação.) Chamam-se “ácido-base” porque mostram semelhanças marcadas com as reações ácido-base que discuti antes, nas quais um protão migra de um ácido para uma base. Na verdade, podem ser vistas como mais uma generalização dos conceitos de ácido e base, mas não lhe levarei agora pelo fascinante caminho dessa paisagem conceptual.

Uma das funções das reações ácido-base de Lewis é trazer cor ao mundo. Esta observação dá-me a oportunidade de lhe apresentar os *complexos de metais de transição*, que são frequentemente intensamente coloridos e que se formam de um modo que chamarei “à maneira de Lewis”. A hemoglobina do seu sangue é um exemplo.

Um metal de transição é um dos elementos da estreita parte central da Tabela Periódica, incluindo ferro (Fe), crómio (Cr — cujo nome antecipa a cor, pois chroma é “cor” em grego), cobalto (Co) e níquel (Ni). Os iões que estes elementos formam, como  $\text{Fe}^{2+}$  e  $\text{Co}^{3+}$ , encontram-se frequentemente rodeados e ligados a seis pequenas moléculas e iões que têm existência independente, como  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$  e  $\text{CN}^-$ . Estas espécies chamam-se ligantes, e os agrupamentos completos chamam-se complexos. Um complexo é mantido unido por ligações formadas pela partilha de um par de eletrões fornecido por cada ligante, pelo que o ião metálico atua como ácido de Lewis (A) e cada ligante como base de Lewis ( $:\text{B}$ ).

Em água, os iões de metais de transição são tipicamente rodeados por seis moléculas de água que atuam como bases de Lewis. Quando outra base de Lewis é adicionada à solução, pode expulsar uma ou mais moléculas de água e ocupar o seu lugar. A estrutura eletrónica do complexo resultante pode ser bastante diferente da do complexo original e, como consequência, ser intensamente colorido. Muitos pigmentos e corantes são complexos formados deste modo.

Respirar é uma reação ácido-base de Lewis. O transportador de oxigénio no nosso sangue é a hemoglobina, uma enorme molécula proteica que tem embebidos quatro iões de ferro. Cada um é mantido no seu lugar por quatro átomos de azoto pertencentes ao arcabouço proteico e dispostos em torno dele nos cantos de um quadrado. As ligações entre o ferro e os átomos de azoto resultam de interações ácido-base de Lewis, com  $\text{Fe}^{2+}$  como ácido e cada  $:\text{N}$  como base. Quando inspira, esta entidade já construída segundo o modelo de Lewis participa numa nova reação ácido-base de Lewis, quando uma molécula de oxigénio, atuando como base de Lewis, usa um par de eletrões para formar uma ligação com um ião  $\text{Fe}^{2+}$  na molécula de hemoglobina. Uma vez

capturado, o precioso oxigénio é transportado pela corrente sanguínea para participar em outras reações no interior do nosso corpo.

A asfixia por envenenamento por monóxido de carbono é outra reação ácido-base de Lewis. Agora, a molécula de monóxido de carbono, CO, pode usurpar o lugar do oxigénio e ligar-se, ao estilo Lewis, aos iões  $\text{Fe}^{2+}$  da hemoglobina. Esta ligação é mais forte do que aquela que o oxigénio consegue formar, pelo que o usurpador bloqueia o local de ligação do oxigénio, impedindo o seu transporte para onde é necessário, e a vítima sufoca. Trata-se de uma asfixia ao nível molecular, não apenas do bloqueio de uma via respiratória. O efeito tóxico do ião cianeto,  $\text{CN}^-$ , que mencionei antes, é semelhante, mas bloqueia uma cascata de reações de transferência de eletrões mais adiante no processo respiratório.

+++

Os químicos orgânicos são mágicos, ou gerais a comandar tropas, quando se trata de mobilizar estes tipos fundamentais de reações. Precisam de o ser, porque as moléculas que ambicionam construir são muitas vezes filigranas delicadas de átomos, e um único átomo fora do lugar pode tornar um fármaco inativo ou atrasar meses de investigação. Ao longo das décadas de desenvolvimento da química orgânica, os químicos acumularam um vasto património de experiência em persuadir os átomos a organizar-se de modo adequado às suas necessidades, por vezes em sequências de reações com dezenas de etapas, qualquer das quais pode reduzir um composto arduamente obtido ao equivalente químico de escombros — um alcatrão negro e inútil. Os procedimentos recebem frequentemente o nome dos químicos que os desenvolveram. O software também ajuda a delinear estratégias, do mesmo modo que é usado para estabelecer o fluxo de trabalho num projeto de construção.

A metáfora do projeto de construção pode ser levada mais longe. Tal como um componente parcialmente concluído pode necessitar de proteção enquanto o resto da construção prossegue à sua volta, também uma molécula em construção pode ter regiões frágeis que, sem proteção, se tornariam centros de reação e originariam produtos indesejáveis. Assim, os químicos podem, por

vezes, fixar um pequeno grupo de átomos numa região da molécula, quer para proteger uma zona vizinha de ataques, quer para ocultar o átomo ao qual está ligado. Esse grupo protetor pode depois ser removido, tal como o invólucro de proteção de um edifício.

Darei apenas dois exemplos de como os químicos orgânicos se ocupam da construção de uma molécula, talvez destinada a ser testada como fármaco, corante ou aroma artificial. Ambos são exemplos de uma reação de substituição, em que um átomo ou grupo de átomos é substituído por outro já presente numa molécula. Em cada caso, o átomo-alvo é detetado pelo reagente que chega como uma região da molécula com uma nuvem eletrónica relativamente delgada ou densa. Se a nuvem for delgada, os núcleos positivamente carregados sobressaem, e uma molécula reagente negativamente carregada irá direccionar-se para essa zona como um míssil guiado. As reações deste tipo, que detetam a carga nuclear, chamam-se *substituições nucleofílicas*. Se, pelo contrário, a nuvem for densa, então as cargas negativas dos eletrões sobrepõem-se à carga positiva dos núcleos, e um “míssil” que chegue com carga positiva será atraído para essa região. Estas reações, que procuram zonas ricas em eletrões, chamam-se *substituições eletrofílicas*.

Ao planear a construção de uma molécula, o químico precisa de refletir sobre o modo como as nuvens eletrónicas se distribuem e escolher o reagente em conformidade. Podem ser extremamente subtis neste procedimento, pois podem fixar grupos de átomos que puxam eletrões para longe de uma região ou, em alternativa, empurram eletrões para ela. Ao modificar a nuvem eletrónica desta forma, o químico pode estar razoavelmente confiante de que o reagente irá encontrar o átomo correto e formar ali uma ligação.

Espero que, neste ponto, já comece a sentir a subtileza com que os químicos abordam a tarefa de criar formas de matéria que talvez não existam em mais lado nenhum do universo. Não será possível, a partir deste relato necessariamente breve, compreender os detalhes de como os químicos engendram as suas reações, mas espero que perceba a ponderação que está por detrás das suas atividades.

## CAPÍTULO 5

---

### AS SUAS TÉCNICAS

---

Para promover as suas reações e identificar o que foi produzido, a química recorre a uma grande variedade de técnicas. Técnicas semelhantes são utilizadas em laboratórios analíticos e forenses para identificar substâncias e as suas abundâncias.

Entre em qualquer laboratório químico moderno e encontrará um espaço híbrido. Um alquimista reconheceria parte do equipamento; o restante seria totalmente estranho. Existem apenas tantas formas possíveis para recipientes destinados a conter fluidos, e a maioria delas tem uma ascendência claramente enraizada no passado. Contudo, a análise moderna — literalmente, a decomposição de substâncias e, na prática contemporânea, a identificação de substâncias e a determinação das suas quantidades e concentrações — recorre a equipamento eletrónico sofisticado e frequentemente automatizado. A análise não é o único objetivo num laboratório, pois o seu oposto, a síntese — literalmente, a junção, mas na prática a criação de formas desejadas de matéria a partir de componentes mais simples — constitui uma parte essencial do trabalho de um químico.

Não me alongarei sobre béqueres, frascos e tubos de ensaio, pois a sua utilidade para conter e misturar fluidos é evidente. Alguns recipientes, no entanto, são concebidos para administrar quantidades conhecidas de líquidos, quer para respeitar, como numa cozinha, uma receita precisa, quer como parte de um método de medição quantitativa. Um exemplo deste último caso é o uso de uma pipeta (inglês dos EUA: *pipet*; um pequeno tubo) e de uma bureta (inglês dos EUA: *buret*; palavra derivada do francês para um pequeno vaso ou jarro, embora, exceto para os mais imaginativos, nada tenha a ver com isso) num dos procedimentos clássicos da química: a titulação de um ácido com uma base, com o objetivo de determinar a concentração de um ou de outro. (Porquê “titulação”? *Titre* é a palavra francesa para ensaio ou teste.) A pipeta serve para

fornecer uma quantidade fixa da solução básica para um frasco cónico; a bureta é usada para deixar cair o ácido até que uma alteração de cor ou um sinal eletrónico de um detetor indique que a base foi exatamente neutralizada. Anotando o volume de ácido adicionado a partir da bureta graduada e conhecendo a sua concentração, a concentração da base pode ser determinada.

Outra classe de aparelhos diz respeito à separação de substâncias, seja para purificar ou isolar um produto. Uma técnica simples, quando o produto é um sólido que precipitou após a mistura de duas soluções, é a “filtração”: passar a solução resultante através de uma malha fina. Outra técnica, frequentemente usada quando é necessário separar líquidos, é a “destilação”: ferver a mistura líquida e condensar o vapor; o componente mais volátil da mistura evapora primeiro e pode ser recolhido ou descartado.

Uma técnica de separação altamente sofisticada é a “cromatografia”. Esta técnica nasceu — e recebeu o nome — quando consistia em pouco mais do que observar que uma gota de solução, talvez extraída de uma planta florífera, se espalhava por papel absorvente e formava bandas de diferentes cores que podiam ser identificadas ou recolhidas. O nome manteve-se, mas a técnica foi imensamente desenvolvida. Atualmente, num procedimento típico, a amostra a analisar é conduzida através de muitos metros de tubos estreitos, cujo interior está revestido por um sólido adsorvente. Os componentes da mistura aderem (o termo técnico é “adsorver”) à superfície em graus distintos e, embora todos cheguem ao final do tubo, emergem em momentos diferentes, podendo assim ser recolhidos separadamente e identificados por outros métodos. Esta técnica é usada para separar a miríade de compostos que contribuem para o sabor de um fruto e, numa forma mais especializada, para detetar explosivos, como acontece em instalações de segurança.

+++

Muito mais interessante — e absolutamente desconcertante para o alquimista — é o equipamento eletrónico existente na sala, revelando apenas os seus ecrãs e mostradores, sem anunciar de imediato a sua função. Muitos destes procedimentos são formas de

*espectroscopia*. O termo deriva da palavra latina *spectrum*, ou aparência, e do processo de observar essa aparência; porém, “observar” tornou-se muito mais sofisticado do que uma simples inspeção visual e “aparência” está hoje extremamente afastada do seu significado cotidiano.

Começarei pela espectroscopia atômica. Quando um elemento é vaporizado e aquecido, um ou mais elétrons de um átomo podem ser ejetados da sua distribuição habitual e permanecer momentaneamente suspensos acima do átomo antes de regressarem à sua nuvem normal. Esse regresso dá um impulso ao que entendemos como o vazio que rodeia o átomo, e o impulso gera um pulso de luz, um fóton. A cor do fóton depende da energia libertada na queda: um colapso de alta energia produz radiação ultravioleta, enquanto colapsos de menor energia produzem luz visível. Os elétrons dos átomos podem existir numa variedade de estados de energia característicos de cada elemento e, ao colapsarem a partir do estado para o qual tenham sido promovidos, geram fótons das cores correspondentes. Todos nós conhecemos o amarelo da iluminação pública, devido aos átomos de sódio a emitir fótons ao regressarem ao seu estado normal, e os néones vermelhos das placas luminosas, decorrentes do elétron de um átomo de néon a colapsar igualmente para o seu estado normal. Ao observar o padrão das cores — ao “registar o espectro” — o elemento presente pode ser identificado.

Os elétrons das moléculas comportam-se de forma semelhante, mas a monitorização das suas energias possíveis faz-se de maneira algo distinta. Enquanto a espectroscopia atômica que descrevi se baseia na emissão de luz, a espectroscopia molecular faz o inverso: recorre à absorção de luz.

A luz que atravessa uma amostra pode ser vista como um fluxo de fótons. Um desses fótons será absorvido se colidir com uma molécula capaz de ser excitada para um estado de energia superior com energia correspondente. A remoção desses fótons — a sua “absorção” — do feixe incidente reduz a intensidade da radiação, o que será registado por um detetor. Para registar o espectro completo de absorção, a cor da luz incidente é variada de forma sistemática, e a intensidade que consegue atravessar a amostra é

monitorizada. Como as moléculas possuem níveis de energia característicos, os seus espectros de absorção são únicos e podem fornecer uma boa indicação da sua identidade.

Concentrei-me na absorção de fotões através da excitação dos eletrões a partir da sua distribuição normal numa molécula. Esse processo exige muita energia e, embora muitas moléculas absorvam luz visível (razão pela qual o mundo é tão colorido), os espectros que descrevi são geralmente observados com radiação ultravioleta. Por isso, a técnica é conhecida como “espectroscopia UV-vis”. Uma técnica intimamente relacionada utiliza fotões de radiação infravermelha, que possuem energia muito mais baixa do que os fotões visíveis ou ultravioleta. Esses fotões podem estimular vibrações das moléculas, e não as suas distribuições eletrónicas. Os “espectros infravermelhos”, portanto, mostram que determinadas vibrações podem ser estimuladas. Isto é extremamente útil para analisar os grupos de átomos presentes numa molécula complexa, porque, por exemplo, um grupo  $\text{CH}_3$  pode oscilar com uma determinada energia e um grupo  $\text{CO}$  pode oscilar com outra.

+++

Talvez a técnica espectroscópica analítica mais importante seja a “ressonância magnética nuclear” (RMN). A palavra “nuclear” levanta sempre um sinal de alerta, razão pela qual foi removida da designação médica “imagiologia por ressonância magnética” (IRM), uma técnica derivada da própria RMN. Os químicos, no geral, são menos sensíveis do que o público em geral e mantêm a palavra “nuclear”, sabendo que, neste contexto, não tem absolutamente nada a ver com os perigos da radioatividade.

O “nuclear” de ressonância magnética nuclear refere-se a qualquer núcleo de qualquer átomo, mas concentrarei a explicação no seu alvo mais comum: o protão, o núcleo de um átomo de hidrogénio. Um protão roda sobre o seu eixo, como a Terra, e essa carga em rotação comporta-se como um pequeno íman de barra. Pode rodar no sentido dos ponteiros do relógio ou no sentido contrário, e o íman correspondente tem o seu polo Norte orientado para cima ou para baixo, conforme o sentido da rotação. Quando o protão em rotação se encontra num campo magnético (na prática, um campo intenso gerado pela passagem de corrente através de

uma bobina supercondutora), as duas orientações possuem energias diferentes, e um fóton incidente com a frequência adequada pode fazer com que um próton orientado para cima (baixa energia) passe para a orientação para baixo (alta energia). A correspondência entre a frequência do fóton e a separação energética é a “ressonância” mencionada no nome; fazemos o mesmo quando sintonizamos um rádio na frequência de um emissor distante. Quando isso ocorre, o fluxo de fótons incidentes é atenuado e a diminuição de intensidade é detetada. A separação energética não é muito grande, e utilizam-se fótons de radiação de radiofrequência, imediatamente acima do extremo de alta frequência de um sinal de rádio FM (cerca de 100 MHz).

Pode parecer uma atividade algo inútil alternar a orientação de um próton. O poder da técnica — e esse poder não pode ser subestimado — reside no facto de a frequência exata a que ocorre a ressonância depender da posição do próton, especificamente do átomo de hidrogénio de que é núcleo, na molécula. Núcleos de hidrogénio com átomos de carbono como vizinhos ressoam a frequências diferentes daqueles que têm átomos de oxigénio ou azoto como vizinhos, e assim o espectro das absorções ressonantes — o “espectro de RMN” — retrata os ambientes de todos os átomos de hidrogénio na molécula.

Mas há mais. Os pequenos ímanes no interior dos átomos de hidrogénio na mesma molécula interagem entre si e modificam mutuamente as suas energias. Essa modificação afeta as frequências de ressonância e origina padrões característicos de absorção, o que é de enorme utilidade ao tentar identificar uma molécula.

Um núcleo de carbono não roda e, por isso, não se comporta como um íman de barra, sendo invisível na RMN. Isso é uma bênção, porque, de outro modo, até uma molécula orgânica bastante simples daria origem a um espectro de RMN impossivelmente complexo. Contudo, os átomos de carbono podem ser tornados visíveis com prudência através da substituição dos átomos de carbono comuns, carbono-12, por um isótopo, o carbono-13, que possui um neutrão adicional no núcleo e é magnético. Uma substituição criteriosa de carbono-12 por carbono-

13 pode, portanto, ser usada para mapear também a localização dos átomos de carbono, permitindo fixar de forma inequívoca a identidade e a estrutura da molécula.

+++

Existe outro tipo de espectrómetro totalmente diferente, que não utiliza absorção nem emissão e que fornece uma perspectiva completamente distinta sobre a identidade de uma molécula. Num “espectrómetro de massa”, uma molécula é despedaçada e os seus fragmentos são pesados, inferindo-se então a composição da molécula a partir das massas desses fragmentos.

A fragmentação molecular é realizada através de um feixe de eletrões, que atinge a molécula, distorce as nuvens eletrónicas que a mantêm unida e origina um conjunto de fragmentos eletricamente carregados. Estes fragmentos carregados são acelerados por um campo elétrico e passam entre os polos de um íman poderoso, que curva as suas trajetórias numa medida que depende da sua massa e da intensidade do campo. Fragmentos com determinada massa incidem num detetor e produzem um sinal. À medida que o campo magnético é alterado, fragmentos de massas diferentes passam a ser detetados, e o espectro — agora um “espectro de massa” — composto pelas massas dos fragmentos é interpretado em termos da estrutura da molécula de origem, de modo semelhante ao reconhecimento da forma de um vaso partido a partir dos seus cacos.

+++

Em biologia, a estrutura é crucial para a função. Na química, a estrutura é quase tudo, sobretudo onde a química se funde com a biologia e os químicos contribuem para o estudo e a elucidação do funcionamento das grandes moléculas proteicas que conhecemos como enzimas. Embora as enzimas sejam fundamentais para regular as reações químicas que constituem todos os aspetos da vida, não são os únicos componentes cruciais dos organismos (incluindo os humanos). A hereditariedade é possibilitada pelo ADN, a sustentação estrutural por proteínas rígidas e ossos, e a perceção e o pensamento por moléculas que detetam e transmitem

mensagens. O funcionamento do organismo como um todo é modulado pelas suas moléculas de imersão.

Uma das ferramentas mais poderosas para descobrir a estrutura é a “difração de raios X” ou, como é sempre aplicada a cristais da substância em estudo, a “cristalografia de raios X”. Esta técnica tem sido uma fonte inesgotável de Prêmios Nobel: começou com a descoberta dos raios X por Wilhelm Röntgen (galardoado em 1901, o primeiro prêmio de Física), depois William Bragg e o seu filho Laurence Bragg em 1915, Peter Debye em 1936, seguindo-se Dorothy Hodgkin (1964) e culminando com Maurice Wilkins (mas não Rosalind Franklin) em 1962, que forneceu a base para a formulação da estrutura em dupla hélice do ADN por James Watson e Francis Crick, com todas as suas enormes implicações para a compreensão da hereditariedade, o combate à doença e a identificação criminal (um prêmio partilhado com Wilkins em 1962). Se existe uma técnica responsável por unir a biologia à química, é esta. Outro aspeto notável desta lista é que o prêmio foi atribuído nas três categorias científicas: química, física e fisiologia e medicina, tal é o alcance da técnica e a iluminação que proporcionou.

Para compreender o fundamento da técnica, é essencial saber que os raios X são feixes de radiação eletromagnética de comprimento de onda muito curto, como a luz, mas com comprimentos de onda mil vezes mais pequenos (cerca de 100 pm — picómetros — aproximadamente o diâmetro de um átomo). A segunda informação essencial é que os raios X, tal como todas as ondas, interferem entre si: onde picos coincidem, o sinal é mais intenso; onde picos coincidem com vales, é mais fraco. Quando um objeto é colocado no caminho de um feixe de raios X, este dispersa-os, e a dispersão por diferentes partes de uma molécula origina feixes que chegam ao detetor por percursos diferentes e que, por isso, podem interferir entre si de várias maneiras. Esta interferência provocada pelo objeto no caminho é a parte “difração” do nome.

Numa determinação por difração de raios X, uma pequena amostra cristalina é rodada na trajetória de um feixe de raios X, e um detetor percorre toda a superfície de uma esfera envolvente, registando os brilhos de interferência construtiva ao longo do

percurso. A partir desse enorme conjunto de observações, é possível aplicar um artifício matemático para estabelecer a disposição dos átomos na amostra. Atualmente, a técnica está amplamente automatizada, com um computador integrado a controlar a recolha e a interpretação dos dados.

A parte mais desafiante da determinação é a obtenção do cristal essencial à técnica, especialmente no caso das grandes moléculas que constituem um dos seus principais alvos de estudo. Se, porém, apenas for necessária a identificação de uma substância, como um mineral, é possível recorrer a uma técnica mais simples, em que a amostra é um pó espalhado numa placa. Quando um feixe de raios X incide sobre o pó, o “padrão de difração em pó” resultante é característico da substância e pode ser identificado consultando uma biblioteca de padrões.

Porquê raios X? Os padrões de difração são obtidos quando o comprimento de onda da radiação é comparável à escala das estruturas que a provocam — neste caso, os átomos responsáveis pela difração. Acontece que os comprimentos de onda dos raios X são comparáveis às separações átomo-átomo nas moléculas, tornando-os ideais para esse fim.



O interior dos sólidos é um lugar fascinante, mas a ação ocorre muitas vezes à superfície. Por exemplo, na catálise, a aceleração de reações pela presença de uma substância que, de outro modo, não participaria nelas, dá-se frequentemente através de um mecanismo que envolve a fixação dos reagentes a uma superfície sólida, por vezes fragmentados, onde ficam predispostos a reagir com outros reagentes. A indústria química deve a sua existência aos catalisadores, pelo que o estudo dos fenómenos que ocorrem nas superfícies é de grande importância.

As superfícies, apesar de serem a face exterior de um sólido, eram difíceis de estudar até há poucos anos, quando uma técnica nova e dramática irrompeu na cena científica. Esta técnica é tão sensível que consegue representar os átomos individuais da superfície e também as moléculas aderidas a ela. Surge em duas

variantes: “microscopia de varrimento por efeito de tunelamento” (STM/MVT) e “microscopia de força atômica” (AFM/MFA).

À primeira vista, o STM pode parecer bastante improvável. Uma agulha é puxada até formar uma ponta extremamente fina e depois varrida em linhas sucessivas sobre a superfície em estudo. O fluxo de corrente elétrica entre a ponta da agulha e a superfície é monitorizado e mapeado num ecrã: os átomos que sobressaem da superfície ficam mais próximos da ponta em movimento e originam um pico de corrente, que é representado como um ressalto no ecrã. O êxito do método depende de um efeito mecânico-quântico denominado “tunelamento” (daí o tunelamento no nome da técnica), no qual os eletrões conseguem atravessar regiões proibidas, neste caso o intervalo entre a superfície e a agulha. O tunelamento é extremamente sensível à largura desse intervalo, pelo que a varredura da superfície consegue detetar variações do tamanho de átomos na própria superfície, bem como revelar, com detalhe impressionante, as formas das moléculas aderidas.

Alega-se frequentemente que os átomos são demasiado pequenos para serem vistos; no entanto, se alargarmos a nossa ideia de “ver” à representação gráfica da variação da corrente de tunelamento, então o STM/MVT desmente essa alegação e oferece-nos imagens extraordinariamente convincentes de átomos e moléculas individuais. Mesmo as superfícies limpas são fascinantes, com montanhas e falésias dignas de Marte, onde os átomos se acumulam, e abismos onde foram perdidos. As superfícies estão agora abertas a uma inspeção direta e detalhada.

A microscopia de força atômica traz intervenção direta às superfícies. Em vez de observar passivamente, a ponta é usada para mover átomos na superfície, empurrando-os de um lugar para outro. Para além de permitir divertimentos como o “nanofutebol”, deslocando uma “buckyballs”  $C_{60}$  sobre a superfície, pode exercer-se um controlo delicadíssimo sobre o arranjo de átomos individuais. Se a ponta for revestida com moléculas de determinado tipo, então, ao movê-la, podem escrever-se padrões na superfície e construir estruturas à escala nano (ver Capítulo 7).

+++

Um instrumento que transformou a química, tal como transformou a vida em geral, nas últimas décadas, é o computador. Praticamente todos os procedimentos laboratoriais, exceto os mais primitivos, são controlados por computadores. Como vimos há pouco, os computadores são intrínsecos à cristalografia de raios X e essenciais para a interpretação dos padrões de difração. São também indispensáveis à Ressonância Magnética Nuclear moderna, onde técnicas especiais são usadas para observar o espectro e exigem extensa manipulação matemática para extrair o espectro efetivo. Há, no entanto, uma aplicação dos computadores por direito próprio: o cálculo e a representação gráfica das estruturas moleculares. Esta é a área da “química computacional”.

Juntamente com os previsores meteorológicos e os decifradores de códigos, os químicos estão entre os utilizadores mais exigentes de computadores poderosos, embora, tal é o progresso do hardware computacional, grande parte da análise possa agora ser realizada num tablet ou até num smartphone.

Um dos ramos da química computacional leva o tema de volta à descrição mecânico-quântica da distribuição das nuvens de eletrões nas moléculas e procura calcular essas distribuições. Estes cálculos envolvem uma grande quantidade de manipulação numérica e uma variedade de aproximações. Embora o resultado seja essencialmente apenas uma lista de números relativos à densidade da nuvem de eletrões ao longo da molécula, esses números ganham vida e tornam-se acessíveis através de representações gráficas da nuvem, que permitem aos químicos avaliar o comportamento provável da molécula. Uma aplicação muito importante, enormemente facilitada pela possibilidade de visualizar as regiões de grande e pequena densidade de eletrões, é a avaliação da atividade farmacêutica de uma molécula e a pré-seleção de compostos potencialmente ativos antes de serem testados *in vivo* em animais.

O segundo ramo, intimamente relacionado, da química computacional diz respeito à forma como uma proteína se dobra na sua estrutura ativa. Uma molécula de proteína é apenas uma longa cadeia de moléculas ligadas quimicamente (aminoácidos), mas dobra-se em hélices e folhas que, por sua vez, se dobram numa

estrutura razoavelmente rígida, essencial à sua função. Embora as forças que atuam entre diferentes partes da mesma molécula sejam bem compreendidas, continua a ser um problema difícil perceber como todas essas forças variadas conspiram para torcer a cadeia até à sua forma final. A Natureza fá-lo; nós ainda não compreendemos como. Como parte do esforço para enfrentar o problema, utilizam-se computadores para seguir as ligações da cadeia molecular enquanto se contorcem e ondulam até atingirem a forma final, numa tentativa de entender como a Natureza o faz sem sequer pensar.

Os computadores também são usados para estudar o comportamento de pequenas moléculas. Uma molécula é lançada contra outra (na imaginação do software), e cálculos permitem observar o que acontece nos momentos mais íntimos de uma reação química, quando as moléculas colidem, as ligações antigas enfraquecem e se formam novas ligações.

+++

Agora gostaria de desviar a atenção da investigação para a síntese, e para uma versão particular de síntese que está atualmente em voga, na qual os químicos nem sempre têm a mínima ideia do que fizeram. Refiro-me à “química combinatória”.

O procedimento tradicional para produzir compostos consiste em trabalhar um de cada vez, com um alvo claramente definido. Na química combinatória, centenas, até milhares, são feitos simultaneamente e depois examinados quanto ao comportamento adequado, por vezes em grupos semelhantes, e só quando surgem candidatos promissores é que estes são analisados, as suas identidades determinadas e então usados como base para trabalho posterior.

O procedimento teve origem na síntese de pequenas tiras de moléculas semelhantes a proteínas, conhecidas como peptídeos, e vou usá-las para ilustrar como é feito. A mesma estratégia foi desenvolvida para uma vasta gama de outros tipos de compostos e deu um impulso importante ao ritmo da “descoberta de fármacos”, o processo de formular compostos com atividade medicinal.

Suponha que temos três aminoácidos, A, B e C. Na Ronda 1, preparamos um recipiente com A e procedemos a realizar uma reação com os três ácidos, o que resultará nos compostos AA, AB e AC. Depois juntamos estes três compostos, misturamo-los e dividimo-los em três porções iguais, cada uma contendo todos os três compostos. Este é o fim da Ronda 1. A Ronda 2 repete o processo: num dos recipientes, o que reage com A, obteremos os três compostos AAA, ABA e ACA; no segundo recipiente, que reage com B, surgem AAB, ABB e ACB; e de forma semelhante para o terceiro recipiente, onde se produzem ACA, ACB e ACC. Estes nove compostos são usados como ponto de partida para a ronda seguinte. Na prática, os 20 aminoácidos naturalmente existentes podem ser usados, em vez dos poucos três deste exemplo, e quatro rondas sucessivas dão 400, 8 000, 160 000 e 5 200 000 compostos. Assim, milhões de compostos podem ser feitos (por robôs) quase num piscar de olhos.

É assim que os químicos produzem substâncias, nem sempre sabendo ou se importando com o que fizeram, esperando que, no meio da profusão de produtos, se encontrem pérolas. É evidente que é necessária uma tarefa considerável de organização para acompanhar as substâncias possíveis em cada mistura (por exemplo, no nosso caso dos três aminoácidos, após a segunda ronda o primeiro recipiente contém apenas três candidatos), e um computador segue o que os robôs estão a fazer. Se, num teste posterior, o conteúdo de um recipiente de mistura revelar uma certa atividade biológica, como inibir uma enzima defeituosa responsável por uma doença, então esse conteúdo pode ser candidato a separação e identificação, sendo o resto eliminado por não ter interesse.

Houve uma altura, há apenas alguns anos, em que os químicos se orgulhavam de ter produzido e identificado cerca de 10 000 000 de compostos. Agora podem produzir muitas vezes esse número num mês, e só ocasionalmente se dão ao trabalho de determinar o que fizeram. Assim avança o progresso.

# CAPÍTULO 6

---

## AS SUAS CONQUISTAS

---

Este capítulo mostra como os princípios e conceitos expostos nos capítulos anteriores contribuem para o mundo moderno. Revê a contribuição da química para os materiais contemporâneos, a medicina, as armas, a agricultura e os transportes. Mostra como a química alterou a textura e a cor do mundo, como mitigou a dor e prolongou a vida, e como proporcionou a infraestrutura material da vida moderna.

Já observei que uma vida sem química nos remeteria à Idade da Pedra. Quase todas as infraestruturas e comodidades do mundo moderno nasceram da investigação química. Nos primórdios da disciplina, quando curiosidade, tradição e alquimia eram cúmplices e a ciência não passava de um ténue rebento, essa investigação decorria sem apoio de uma teoria correta e o progresso fazia-se de forma dolorosamente lenta. Agora que a disciplina atingiu maturidade, com a curiosidade aliada de modo frutuoso à compreensão e à aplicação, a investigação tornou-se amplamente racional e os seus feitos, substanciais.

Na aceção mais ampla possível, os químicos descobriram como tomar uma forma de matéria e dela fazer surgir uma forma diferente. Nalguns casos, descobriram como extrair matérias-primas da Terra, como petróleo ou minério, e produzir diretamente a partir delas materiais como combustíveis petrolíferos e ferro para a produção de aço. Descobriram também como colher o que o céu oferece, tomando o azoto da atmosfera e convertendo-o em fertilizante. Além disso, aprenderam a criar formas altamente sofisticadas de matéria, adequadas para utilização como tecidos ou como substâncias necessárias às tecnologias que hoje consideramos de ponta, sabendo que tecnologias ainda mais avançadas virão — e que serão possibilitadas, podemos afirmá-lo com confiança, pela química.

+++

Começarei esta descrição das inúmeras realizações da química considerando os famosos quatro assim chamados elementos da Antiguidade: terra, ar, fogo e água.

Primeiro, a água, absolutamente essencial para possibilitar a vida, tanto ao nível dos organismos individuais como ao nível das sociedades globais. A química tornou possível a vida em comunidade através da sua utilização para purificar a água e livrá-la de agentes patogénicos. O cloro é o principal agente que permite a existência das cidades: sem ele, a doença seria desenfreada e a vida urbana seria um risco, mais próxima de uma morte urbana, tal como acontecia antigamente. Os químicos encontraram formas de extrair este elemento de uma fonte abundante — o cloreto de sódio, sal comum — utilizando a eletrólise para oxidar os iões cloreto no sal fundido e retirando um eletrão a cada um, convertendo-os assim no elemento. O gás vigoroso que é o cloro ataca então os agentes patogénicos, tornando-os inofensivos.

Os químicos estão na linha da frente na batalha por obter água potável a partir de água salobra, de água contaminada em aquíferos e daquela fonte mais abundante de todas: os oceanos. Contribuíram de forma direta para esta tarefa crucial ao desenvolver a “osmose inversa”, o processo em que a água é comprimida através de membranas que filtram os iões que a tornam imprópria para consumo. Contribuem também de forma indireta ao desenvolver membranas capazes de suportar as altas pressões envolvidas e que aumentam a eficiência do processo. É desnecessário dizer que as competências tradicionais dos químicos em análise — descobrir o que está presente, o que pode ser tolerado e o que é essencial remover — são fundamentais neste esforço.

Passemos então à terra, fonte do alimento. À medida que a população global cresce e a área de terras produtivas se reduz, torna-se cada vez mais importante estimular as culturas a alcançarem maior abundância e fecundidade. A engenharia genética (uma técnica química, realizada literalmente em frutífera colaboração com a biologia) é uma via possível, mas continua a ser controversa por diversas razões, algumas plausíveis, outras não. A forma tradicional de estimular a abundância é aplicar fertilizantes. Aqui, os químicos contribuíram substancialmente ao encontrar

fontes economicamente viáveis de azoto e fósforo e ao garantir que estes possam ser convertidos em formas assimiláveis pelas plantas.

O ar abastece a terra. O azoto (N), um dos elementos essenciais para a agricultura, é extraordinariamente abundante, constituindo quase três quartos da atmosfera; porém, encontra-se numa forma que a maioria das plantas não consegue assimilar. Esta teimosa inércia deve-se quase inteiramente ao facto de os dois átomos de azoto de uma molécula de azoto ( $N_2$ ) estarem ligados por uma poderosa ligação tripla — três pares de eletrões partilhados — e serem notoriamente difíceis de separar. De facto, essa é a principal razão pela qual o azoto atmosférico é tão abundante no ar: simplesmente permanece alheio à maioria das tentativas de reagir com ele, exigindo relâmpagos ou as bactérias associadas a certas plantas leguminosas para o fixar quimicamente.

Uma das maiores realizações da química, alcançada nos primeiros anos do século XX sob o impulso não de um desejo humano de alimentar, mas de um desejo desumano de matar, foi descobrir como colher azoto do ar e transformá-lo numa forma que pudesse ser absorvida pelas culturas (e utilizada para fabricar explosivos). Essa realização, de Fritz Haber e Carl Bosch, foi um marco na indústria química, pois além de depender da descoberta de catalisadores apropriados para facilitar a reação entre os gases azoto e hidrogénio para formar amoníaco ( $NH_3$ ), exigiu o desenvolvimento de instalações industriais que operassem a temperaturas e pressões nunca antes alcançadas. Mas o processo, ainda hoje utilizado globalmente, continua a ser intensivo em energia. Seria maravilhoso se os processos que se sabe ocorrerem nas bactérias que habitam os nódulos das raízes da alfafa, do trevo, do feijão, da ervilha e de outras leguminosas pudessem ser emulados em escala industrial e aproveitados para capturar azoto atmosférico. Os químicos dedicaram décadas de investigação a esta possibilidade, dissecando em detalhe as enzimas que as bactérias utilizam de forma tranquila e energeticamente eficiente, a baixa pressão e baixa temperatura. Existem indícios de sucesso, mas nenhum método é ainda comercialmente viável.

O fósforo (P) também é abundante, sendo o remanescente de animais pré-históricos. Os seus ossos de fosfato de cálcio e a sua

fonte interna de energia especial — as moléculas de ATP (adenosina trifosfato) que alimentam cada uma das nossas células e das deles — jazem em grandes montes comprimidos sob os oceanos do mundo como rocha fosfática. Aqui, os químicos ajudam a “minerar os mortos para alimentar os vivos”, ao encontrarem formas de extrair o fósforo destas fontes enterradas e reutilizá-lo no grande ciclo da sustentabilidade.

Depois da água, do ar e do alimento que brota da terra, precisamos de energia, o representante do fogo neste quarteto. Nada acontece no mundo sem energia, e as civilizações colapsariam se ela deixasse de estar disponível. As civilizações avançam ao utilizarem energia em quantidades cada vez maiores, e os químicos contribuem a todos os níveis e em todos os aspetos do desenvolvimento de novas fontes e da aplicação mais eficiente das fontes atuais.

O petróleo é, claro, uma fonte de energia extraordinariamente conveniente, pois pode ser transportado facilmente, até em aeronaves sensíveis ao peso. Os químicos contribuíram longamente para o refinamento do material bruto extraído do subsolo. Desenvolveram processos e catalisadores que permitiram pegar nas moléculas fornecidas pela Natureza e cortá-las em fragmentos mais voláteis, remodelando-as para que ardessem de forma mais eficiente. Mas queimar o tesouro subterrâneo da Natureza poderá um dia ser visto pelas gerações futuras como a destruição insensata de um recurso inestimável, semelhante à extinção de espécies. É também finito e, embora novas fontes economicamente viáveis de petróleo continuem a ser descobertas, pelo menos por agora, a sua extração tem-se revelado perigosa e cada vez mais dispendiosa. Temos de aceitar que, embora um planeta esvaziado esteja ainda a décadas de distância, um dia chegará, e isso deve ser antecipado.

Onde procuram atualmente os químicos novas fontes? O Sol, aquele longínquo e furioso forno de fusão nuclear no céu, é uma fonte evidente, e a forma como a Natureza captura a sua energia — a fotossíntese — é um modelo óbvio a tentar emular. Os químicos já desenvolveram materiais fotovoltaicos moderadamente eficientes e continuam a melhorar essa eficiência. A Natureza, com os seus 4 mil milhões de anos de vantagem sobre os químicos de

laboratório, já desenvolveu um sistema altamente eficiente baseado na clorofila e, embora os aspectos principais do processo sejam compreendidos, um desafio para os químicos é pegar no modelo da Natureza e adaptá-lo a uma escala industrial. Uma via é usar a luz solar para decompor a água nos seus elementos constituintes — o desejável hidrogénio e o já abundante oxigénio — e canalizar ou bombear o hidrogénio para onde possa ser queimado.

Digo “queimado”. Os químicos sabem que existem maneiras mais subtis e eficientes de utilizar a energia representada pelo hidrogénio e pelos hidrocarbonetos do que simplesmente incendiá-los, capturar a energia libertada sob a forma de calor e usar esse calor num motor mecânico e ineficiente ou num gerador elétrico. A eletroquímica, o uso de reações químicas para gerar eletricidade e de eletricidade para provocar transformação química, tem um potencial de enorme importância para o mundo. Os químicos já ajudaram a produzir as fontes móveis — as baterias — que alimentam os nossos pequenos dispositivos portáteis, como lanternas, leitores de música, computadores portáteis, telefones, dispositivos de monitorização de todos os tipos e, cada vez mais, os nossos veículos.

Os químicos estão profundamente envolvidos, em colaboração com engenheiros, no desenvolvimento de “pilhas de combustível” em todas as escalas: desde alimentar computadores portáteis até fornecer energia a casas inteiras e, concebivelmente, a aldeias. Numa pilha de combustível, a eletricidade é gerada ao permitir que reações químicas depositem e extraiam eletrões em superfícies condutoras, enquanto o combustível — hidrogénio ou hidrocarbonetos — é fornecido do exterior. A viabilidade de uma pilha de combustível depende de forma crucial da natureza das superfícies onde ocorrem as reações e do meio em que estão imersas.

Até a energia nuclear, tanto de fissão como um dia de fusão (a emulação na Terra do Sol), depende das competências dos químicos. A construção de reatores nucleares depende da disponibilidade de novos materiais, e a extração de combustível nuclear sob a forma de urânio e dos seus óxidos a partir dos seus minérios envolve química. É do conhecimento geral que um dos

receios que impede o desenvolvimento e a aceitação pública da energia nuclear, para além de problemas políticos e económicos, é o problema de como eliminar o combustível gasto altamente radioativo. Os químicos contribuem ao encontrar formas de extrair isótopos úteis dos resíduos nucleares e ao encontrar modos de garantir que estes não entrem no ambiente e não se tornem um perigo durante séculos.



Referi-me à aparente destruição imprudente de um recurso inestimável quando a complexa mistura orgânica que conhecemos como petróleo é sugada do subsolo, onde permaneceu durante milénios, e depois casualmente queimada. Claro que nem todo o petróleo é utilizado em motores, com os seus produtos de combustão expelidos pelos escapes dos nossos automóveis, camiões, comboios e aviões. Grande parte é extraída e utilizada como o início de uma impressionante cadeia de reações desenvolvidas pelos químicos e que constituem a indústria petroquímica.

Olhe à sua volta e identifique o que os químicos alcançaram ao pegar no petróleo bruto, negro e viscoso, que emerge da Terra, ao submetê-lo às reações que desenvolveram, e ao entregar os produtos aos fabricantes dos artefactos do mundo moderno.

Talvez o maior impacto destes processos tenha sido o desenvolvimento dos plásticos. Há um século, o mundo quotidiano era metálico, cerâmico ou natural, com objetos construídos de madeira, lã, algodão e seda. Hoje, uma abundância de objetos é construída a partir de materiais sintéticos derivados do petróleo. Os nossos tecidos são fiados a partir de materiais desenvolvidos pelos químicos; viajamos carregando malas e estojos feitos de sintéticos; o nosso equipamento eletrónico — televisões, telefones e computadores portáteis — é moldado a partir de sintéticos. Os nossos veículos são cada vez mais fabricados com sintéticos. Até o aspeto e o toque do mundo são agora diferentes do que eram há cem anos: toque num objeto de hoje e a sua textura é tipicamente a de um material sintético. Por esta transformação, estamos em dívida para com os químicos, que descobriram como cortar as longas moléculas exsudadas pela Terra e depois reagrupá-las em

cadeias muito longas no processo de polimerização. Assim, o etileno ( $\text{CH}_2=\text{CHX}$ , com  $\text{X} = \text{H}$ ) é fiado em polietileno e utilizado para tudo, desde compras (sacos de plástico, uma bênção ambígua) até ajudar a vencer a Segunda Guerra Mundial (como revestimento de cabos de radar). Como mencionei no Capítulo 4, quando  $\text{X}$  é cloro,  $\text{Cl}$ , os monómeros são transformados em PVC, que substituiu a madeira e o metal em grande parte dos trabalhos de construção.

Embora a conveniência dos sacos de plástico possa ser superada pelo impacto negativo que têm no ambiente, pense no que não teríamos se nenhum dos materiais poliméricos inventados pelos químicos e produzidos em massa existisse. Imagine um mundo sem nylon e sem os poliésteres dos tecidos para vestuário, estofos e decoração. Imagine um mundo com apenas pesados recipientes metálicos para bebidas, alimentos e produtos domésticos. Imagine um mundo sem todos os pequenos artefactos plásticos da vida quotidiana — interruptores, fichas, tomadas, brinquedos, cabos de facas, teclados, botões... a lista é quase literalmente interminável, tão ubíqua é a presença dos materiais poliméricos gerados pela química.

Mesmo que lamente a passagem de muitos materiais naturais, pode ainda agradecer aos químicos pela sua preservação onde continuam a ser utilizados. A matéria natural apodrece, mas os químicos desenvolveram materiais que garantem que essa deterioração seja adiada. Em suma, os químicos fornecem novos materiais quando estes são considerados apropriados ou desejáveis e fornecem meios de prolongar a vida dos materiais naturais quando o juízo e a escolha assim o determinam.

Os plásticos são apenas uma das faces da revolução nos materiais que caracterizou os últimos cem anos e que continua vigorosamente hoje. Os químicos desenvolvem as cerâmicas que começam a substituir os metais utilizados nos veículos, tornando-os mais leves e aumentando a eficiência dos nossos sistemas de transporte, com a consequente diminuição do seu impacto no ambiente. As cerâmicas, claro, são materiais de grande antiguidade, pois são a substância de que são feitos os vasos (outra contribuição largamente ignorada para a viabilidade da vida social). As cerâmicas modernas são elaboradas de forma mais sistemática

a partir de argila purificada e outros materiais, e por vezes exibem propriedades surpreendentes. Quem, por exemplo, suspeitaria que uma determinada classe de cerâmicas, cozida a partir de uma espécie de “poção de bruxa” de elementos, possuiria a notável propriedade da *supercondutividade* — a capacidade de conduzir eletricidade sem resistência? Este material, que opera a temperaturas muito baixas, mas ainda assim muito mais altas do que as dos materiais supercondutores anteriormente conhecidos e, por isso, mais encorajador e aceitável do ponto de vista económico, continua à procura de aplicações, pois fabricar fios e filmes a partir de cerâmicas permanece um problema desafiante.

As cerâmicas incluem o vidro. O vidro moderno inclui a fibra ótica que constitui a espinha dorsal do nosso sistema global de comunicações. O vidro é fundamentalmente sílica (dióxido de silício,  $\text{SiO}_2$ ), proveniente da areia purificada, tornada líquida e depois deixada arrefecer. Ao longo dos séculos, os químicos têm ajustado esta composição fundamental e deram-nos o vidro colorido — o vitral — onde tonalidades cativantes são produzidas por impurezas adicionadas com cautela e seletividade. Certamente, nos primórdios, as cores eram desenvolvidas pela perícia e sabedoria dos vidreiros, então não especificamente químicos. Mas hoje são os químicos que formulam a composição dos vidros que, em alguns casos, são ricamente coloridos e, noutros — especialmente nas fibras — são extraordinariamente transparentes e capazes de transmitir impulsos de luz a grandes distâncias com atenuação mínima.



O mundo das fabricações humanas seria monótono sem as contribuições dos químicos. As cores vibrantes eram antigamente domínio dos ricos, que podiam suportar o elevado custo de adquirir corantes naturais, como o púrpura de Tiro, extraído do muco glandular de certos caracóis marinhos (*Bolinus brandaris*), onde 12.000 caracóis são ordenhados ou esmagados de forma imprudente para se obter pouco mais de um grama de corante, que mal se consegue tingir a bainha de uma capa, ou como o lápis-lazúli (a “pedra do céu”), vindo do distante Afeganistão, para um ultramarino profundo e apelativo. Depois surgiu William Perkin

(1838–1907) que, ao tentar sem sucesso sintetizar quinino, sem a vantagem de conhecer a sua estrutura, com o objetivo de poupar os exércitos e burocratas do império à malária, tropeçou antes no corante a que chamou *mauveína*, salvando assim caracóis marinhos em vez de soldados da chacina e, incidentalmente, fundando a indústria química britânica. Assim lançou as bases para a geração de toda a sua riqueza pessoal e de grande parte da riqueza nacional da Grã-Bretanha.

Os químicos acrescentaram todo um espectro de cores ao mundo material, que deixou de ser monótono — exceto quando necessário (como na camuflagem) — e passou a poder ser tudo, desde vibrante e assertivo até delicadamente subtil. Não só a gama de cores é agora enorme, com fluorescência e brilho refletivo adicionados à paleta, como também as cores são resistentes à luz e suportam os rigores da lavagem.

As cores criadas quimicamente não se limitam aos tecidos. Foram desenvolvidos pigmentos em geral; não apenas os materiais colorantes em si, mas também o meio de suporte, como nas tintas usadas em edifícios e nos acrílicos utilizados por artistas. Pense nos avanços realizados nas tintas domésticas: melhorias nas suas propriedades de escoamento, na sua estabilidade em atmosferas agressivas e na sua gama de cores, incluindo cores que desvanecem intencionalmente para mostrar onde a tinta está a ser aplicada.

Até as cores dos ecrãs de televisão e dos monitores de computador recorrem a sólidos desenvolvidos por químicos. Foram-se os dias dos tubos de raios catódicos, volumosos e vorazes em energia. Entrámos agora no mundo dos cristais líquidos, dos ecrãs de plasma e dos OLED (díodos orgânicos emissores de luz). Os cristais líquidos e os OLED são formados por moléculas construídas por químicos e que respondem de formas especiais aos campos elétricos, tornando possíveis os dispositivos portáteis com ecrãs visuais.



Os químicos são também responsáveis pelo desenvolvimento dos semicondutores que sustentam o mundo moderno da comunicação e da computação. De facto, uma das principais

contribuições da química é atualmente o desenvolvimento daquilo que pode ser considerado a infraestrutura material do mundo digital. Os químicos desenvolvem os semicondutores que estão no coração da computação e as fibras óticas que estão a substituir cada vez mais o cobre na transmissão de sinais. Os ecrãs que funcionam como interfaces com o sistema visual humano são resultado do desenvolvimento de materiais por parte dos químicos.

Atualmente, os químicos estão a desenvolver computadores moleculares, nos quais os interruptores e as memórias se baseiam em alterações na forma das moléculas. O desenvolvimento bem-sucedido de tais materiais — e, com o otimismo tão típico da ciência, podemos ter confiança de que o esforço será bem-sucedido — resultará num aumento sem precedentes da capacidade computacional e numa espantosa compacidade. Se estiver interessado no desenvolvimento destes materiais inteligentes (*smart materials*), então pode esperar contribuir para uma revolução na computação. Há também a perspetiva do desenvolvimento da computação quântica, que dependerá da capacidade dos químicos em desenvolver novos materiais adequados e resultará numa revolução quase imprevisível na comunicação e na computação.

+++

Mal mencionei a saúde. Uma das grandes contribuições da química para a civilização humana (e, há que acrescentar, para o bem-estar dos rebanhos) foi o desenvolvimento de fármacos. Os químicos podem sentir justo orgulho pela sua contribuição para o desenvolvimento de agentes que combatem doenças. Talvez a sua contribuição mais bem-recebida tenha sido o desenvolvimento dos anestésicos e a consequente atenuação da perspetiva da dor. Imagine submeter-se a uma amputação há 200 anos, tendo apenas conhaque e dentes cerrados para lhe sustentarem! Em importância seguinte esteve o desenvolvimento, por químicos — muitas vezes observando atentamente a Natureza —, dos antibióticos. Há um século, a infeção bacteriana era uma perspetiva mortal, mas agora, graças à disponibilidade da penicilina e dos seus descendentes modificados quimicamente, é curável. Temos de esperar que assim

continue, mas também de nos preparar para o contrário, à medida que as bactérias evoluem para escapar ao seu némesis.

As empresas farmacêuticas são frequentemente alvo de críticas pelo que muitos consideram serem lucros excessivos e exploração. Mas merecem uma simpatia prudente. O seu motivo subjacente é o admirável objetivo (ainda que com o lucro em vista) de reduzir o sofrimento humano através do desenvolvimento de medicamentos que combatem doenças. Os químicos estão no coração deste esforço. É altamente lamentável que o desenvolvimento seja tão dispendioso. As técnicas computacionais modernas estão a ajudar na procura de novas linhas de abordagem e a reduzir a dependência de testes *in vivo* em animais, mas é necessária uma cautela extraordinária ao introduzir materiais estranhos em corpos humanos vivos, e anos de investigação dispendiosa podem ser de repente inutilizados se, na fase final de testes, forem descobertas consequências inaceitáveis.

Estreitamente ligada à contribuição dos químicos para o alívio da doença está a sua intervenção ao nível molecular. A biologia tornou-se química há meio século, quando a estrutura do ADN foi descoberta (em 1953). A biologia molecular, que em grande medida brotou dessa descoberta, é química aplicada ao funcionamento dos organismos. Os químicos, muitas vezes disfarçados de biólogos moleculares, abriram a porta para a compreensão da vida e da sua principal característica — a hereditariedade — ao nível mais fundamental, abrindo assim vastas regiões do mundo molecular à investigação racional. Transformaram também a medicina forense, trouxeram criminosos à justiça e revolucionaram a antropologia.

A mudança de atenção da química para os processos da vida veio num momento em que os ramos tradicionais da química — orgânica, inorgânica e física — atingiram um estágio de considerável maturidade e estão prontos para abordar a rede de processos de complexidade assombrosa que ocorre dentro dos organismos, em particular dos corpos humanos. A abordagem ao tratamento e, mais importante ainda, à prevenção da doença foi colocada numa base racional pelas descobertas que os químicos continuam a fazer. Se planeia entrar neste campo, então a genómica e a proteómica revelar-se-ão de importância crucial para

o seu trabalho. Esta é verdadeiramente uma região da química onde pode sentir confiança ao erguê-lo sobre os ombros dos gigantes que lhe antecederam e saber que está a atacar a doença nas suas raízes.



Depois há o lado negro da química. Seria inadequado, nesta descrição das grandes realizações da química, não mencionar a sua capacidade de ampliar a aptidão humana para causar danos e matar, pois, essas realizações tiveram um custo, em alguns casos para a vida humana, noutros para o ambiente.

Primeiro, os avanços feitos na arte de matar e mutilar. Os químicos foram responsáveis pelo desenvolvimento de gases destinados à guerra e pela otimização de explosivos. Na verdade, Fritz Haber, que mencionei a propósito da sua invenção do processo de síntese da amónia que levou à ampla disponibilidade de fertilizantes potentes, foi também uma figura de liderança no desenvolvimento de gás venenoso. Há a esperança de que a eliminação de tais armas permita julgar a sua contribuição líquida para a vida humana de forma mais benigna, apesar do modo como avaliamos a sua personalidade. Embora os governos sejam responsáveis pela utilização de armas tão terríveis, os químicos que contribuíram para o seu desenvolvimento não podem, a meu ver, evitar a nossa condenação. Nenhum bem resultou do desenvolvimento de armas químicas que pudesse colocar-se na balança oposta para mitigar a nossa condenação: são mal puro. Numerosos estados, não apenas os mais poderosos, mas abrangendo cerca de 98 por cento da população mundial, rejeitaram-nas como armas ilegais de guerra, e espera-se que os restantes sigam o mesmo caminho e adiram ao tratado que as proíbe.<sup>1</sup>

A guerra química pode ser travada por acidente. Assim aconteceu em Bhopal, na Índia, em 1984, quando a fábrica da Union Carbide ali existente ficou descontrolada, resultando — segundo fontes oficiais — em quase 4.000 mortes diretamente relacionadas com o desastre e mais 8.000 nas duas semanas seguintes, com

---

<sup>1</sup> Para informações sobre a composição atual e o estado da organização, consulte <http://www.opcw.org>, o site oficial da Organização para a Proibição de Armas Químicas, sediada em Haia.

mais de 500.000 feridos. Uma guerra química intencional nunca foi tão “bem-sucedida”. A causa imediata do desastre foi a entrada de água num reservatório sobrecarregado e insuficientemente arrefecido do composto isocianato de metilo ( $\text{CH}_3\text{NCO}$ ), um intermediário no processo de fabrico de um pesticida. A diminuição da procura desse pesticida na época levou à acumulação de quantidades superiores ao normal do intermediário. Como a água entrou permanece debatido: a empresa mantém que se tratou de sabotagem por parte de um funcionário descontente; outros defendem que entrou acidentalmente numa fábrica onde os controlos de segurança estavam desorganizados, ineficazes, ausentes, inadequados e ignorados. A reação subsequente libertou 30 toneladas de gás tóxico na atmosfera, levando morte e sofrimento físico e emocional incalculável aos habitantes da densamente povoada favela circundante.

Comentários sobre os perigos inerentes das fábricas químicas seriam ociosos, e sugerir que os riscos superam as vantagens seria banal. No entanto, tais catástrofes são muito raras, e temos de esperar que as lições aprendidas pelo terrível preço pago inspirem melhores práticas no desenho e operação das fábricas que, na sua maioria, contribuem para o nosso bem-estar.

A outra faceta sombria da química é a sua capacidade de fornecer, melhorar e fabricar explosivos. Aqui a faceta não é inteiramente negra, pois os explosivos são úteis em pedreiras e minas. A faceta verdadeiramente negra é a sua utilização em bombas e no fornecimento da força propulsora de projéteis: balas, morteiros e similares. Os explosivos são compostos que, quando detonados, sofrem uma reação muito rápida — essencialmente, as moléculas fragmentam-se em pequenas partículas que formam um gás, e a geração muito rápida desse gás cria o choque destrutivo ou impulsivo da explosão.

Nos primórdios dos explosivos, a pólvora era soberana. A sua ação depende da íntima mistura de agentes oxidantes (enxofre, nitrato de potássio) e de substâncias que podem ser oxidadas (carvão vegetal, essencialmente uma forma impura do elemento carbono). A migração de eletrões dos agentes oxidantes para o carbono, arrastando átomos, resulta em grande número de

pequenas moléculas — um gás. Desde então, substâncias e misturas foram desenvolvidas que reagem mais rapidamente e, conseqüentemente, produzem um choque mais intenso. Em vez da simples mistura de componentes, os químicos trabalharam rumo à intimidade máxima: garantir que os componentes oxidantes e oxidáveis fossem partes da mesma molécula, de modo que a transferência de elétrões e a subsequente reorganização de átomos e fragmentação molecular fossem tão rápidas quanto possível, e que grandes quantidades de pequenas moléculas fragmentadas se formassem para amplificar o choque. Entre tais compostos é famoso o nitroglicerol. Este composto altamente instável foi domado quando Alfred Nobel (1833–96) descobriu que podia ser absorvido por um tipo de argila porosa, formando assim a dinamite e, em devido tempo, proporcionando os fundos para o estabelecimento de uma das maiores fundações de apaziguamento de consciência, a Fundação Nobel, comprometida, como os seus prêmios, com a melhoria da condição humana e a promoção da paz.

+++

Enquanto permanecemos neste canto embaraçosamente negativo da química, não posso evitar outro grande dedo apontado: aquele dirigido aos danos ambientais atribuídos à disciplina, ou pelo menos aos seus despejos. É impossível negar que o efluente indesejado das fábricas químicas causou estragos ecológicos. Desde que as fábricas de Perkin tingiram os canais próximos de vermelho, verde e amarelo conforme as prioridades de fabrico do dia, a aspiração da humanidade ao seu próprio progresso teve um custo ambiental. Na verdade, os ténues rebentos da poluição ambiental — se não for demasiado irónico utilizar esta expressão — podem ser rastreados até aos Gregos e Romanos, pois análises de núcleos de gelo depositados naquelas Eras mostram vestígios das conseqüências do trabalho metalúrgico.

O caminho a seguir é jurídico ou químico. O jurídico constrange pela perspectiva de punição; o químico evita eliminando na origem. Este último, sempre o modo de ação preferível, depende do próprio desenvolvimento da química e inspirou o movimento político-ambiental-químico da *química verde*. Em termos gerais, a química verde procura minimizar o impacto dos processos de fabrico

químico no ambiente através de diretrizes rigorosas relativas à utilização de materiais e à eliminação de resíduos.

Os defensores da química verde começam pela proposição plausível de que é melhor evitar resíduos do que limpá-los depois de gerados. A implicação desse princípio fundamental é que os materiais de partida utilizados num processo devem aparecer — tanto quanto possível — na sua totalidade no produto final: todos os átomos que entram devem aparecer nas moléculas do produto, com o mínimo possível descartado como indesejado. É nesta implicação que surgem impactos económicos e tecnológicos consideráveis e, portanto, relutância comercial, pois processos e fábricas precisam ser desenhados em conformidade e matérias-primas específicas adquiridas em fontes incómodas, possivelmente a grande custo.

Com o processo otimizado — e particularmente se a otimização estiver além do alcance tecnológico e económico — os procedimentos devem ser concebidos para evitar ou pelo menos minimizar o envolvimento, não apenas como resíduos, mas também como intermediários potencialmente escapáveis, de compostos tóxicos. Essa exigência aplica-se igualmente ao produto final, que deve apresentar risco mínimo de toxicidade para a vida humana (como os formalizadores dos princípios identificaram, mas parece mais do que apropriado acrescentar organismos em geral) e para o ambiente. A restrição também se aplica aos materiais auxiliares utilizados no processo, especialmente os líquidos empregados como solventes e que podem — talvez “podem” em alguns processos atuais deva ler-se “devem” — ser libertados no ambiente, mesmo em pequenas quantidades, quando surgem fugas nos procedimentos de reciclagem. Os químicos, até nos seus próprios procedimentos laboratoriais minúsculos, são investigadores essenciais de solventes benignos e do desenvolvimento de reações que ocorram nestes ambientes novos e pouco familiares.

Outra aspiração ideal dos proponentes da química verde é que a matéria-prima seja renovável. A renovabilidade pode assumir diversas formas, mas todas evitam a extração brutal de recursos da Terra. A Natureza fornece colheitas todos os anos, e estas contam como renováveis devido à benevolência do Sol e ao seu papel no

ciclo de reciclagem do dióxido de carbono através da fotossíntese. Outros materiais além do dióxido de carbono podem ser reciclados, e foram propostas ideias para tratar os aterros como minas, mas esse recurso é perigoso e não está sujeito ao juízo geológico.

Os defensores da química verde reconhecem outra contribuição para os resíduos e a poluição: o papel da energia num processo químico. Qualquer exigência energética impõe encargos ao ambiente, seja pela necessidade de combustível, seja pelo impacto dos gases de escape na atmosfera. Idealmente, todos os procedimentos deveriam decorrer sem necessidade de aquecimento e, ainda mais dispendioso e destrutivo, de arrefecimento.

Depois há vários requisitos mais técnicos para que o processo seja o mais verde possível. Muitos procedimentos em química orgânica, tal como na fabricação de fármacos, exigem etapas intermédias em que as moléculas são temporariamente modificadas no seu caminho rumo ao produto final. Cada etapa exige condições especiais, os seus próprios reagentes e talvez uma variedade de solventes nocivos. O processo avança para o extremo verde do espectro produtivo ao minimizar estes intermediários e ao procurar vias mais diretas entre matéria-prima e produto.

Os químicos de visão mais avançada olham para além do processo em si, contemplando todo o ciclo de vida do produto e procurando formas de garantir que, no final da sua vida útil, o produto — e tudo em que ele se degrade — não seja tóxico nem se degrade, no ambiente, em resíduos tóxicos. A consideração do “ciclo de vida completo” inclui a antecipação de desastres durante o próprio processo de fabrico (recordando Bhopal), com a implicação de precaução de que tudo o que for produzido ou armazenado deve, no caso de acidente, ter um impacto mínimo no ambiente. A mitigação da possibilidade de catástrofe exige a análise constante e fiável de todos os componentes e condições dos recipientes de reação e de armazenamento e procedimentos de monitorização à prova de falhas que não possam, como em Bhopal, ser ignorados ou contornados.

Tais são as aspirações da química verde. A consideração subjacente é que é essencial recorrer à química para resolver — e, de preferência, evitar — os problemas que ela própria pode causar.

Há sempre, claro, uma tensão entre o lucro comercial e a responsabilidade social e ambiental, tensão essa que não é ajudada por baixos níveis de supervisão em alguns contextos, o que permite que a indústria escape, quase literalmente, impune.

A caixa de Pandora sempre foi assim: interferir com a Natureza implica invariavelmente risco. Os químicos interferem nas raízes da própria Natureza material, pegando nos átomos que ela fornece e recastando-os (reorganizando-os) em compostos que lhe são estranhos e que, ao intrudirem (introduzir-se de forma intrusiva) no seu ecossistema, podem perturbar os delicados equilíbrios da vida. Com esta capacidade merlinesca (quase mágica) de conjurar com átomos vêm responsabilidades que nem sempre foram reconhecidas no passado, mas que, sob pressão social, estão agora bem presentes na consciência de responsabilidade da indústria química.

A consideração crucial, porém, é saber de onde virão soluções fiáveis para os problemas do mundo, se não do desenvolvimento contínuo da química. A química detém a chave para a melhoria de quase todos os aspetos da nossa vida quotidiana, do berço à sepultura e em todos os pontos intermédios. Forneceu a base material de todos os nossos confortos, não só na saúde, mas também na doença, e não há razão para supor que tenha alcançado o seu zénite. Contribui para as nossas comunicações, tanto virtuais como físicas, pois fornece os materiais ao longo dos quais os nossos eletrões e fótons viajam na complexa rede de padrões e interações que resultam na computação. Além disso, desenvolve os nossos combustíveis, tornando-os mais eficientemente combustíveis e, através da catálise, minimizando os seus produtos nocivos, e ajuda na migração dos combustíveis fósseis para fontes renováveis, como no desenvolvimento de substâncias fotovoltaicas. A química é a única solução para os problemas que ela própria causa no ambiente, seja na terra, no ar ou na água.

+++

Há outra realização da química que seria inadequado ignorar nesta análise: o facto de proporcionar compreensão sobre o funcionamento do mundo material, compreensões que vão da rocha ao organismo. A compreensão é um enriquecimento da condição

humana, pois dá entendimento ao assombro e, assim, acrescenta ao nosso deleite.

Através da química compreendemos a composição e a estrutura dos minerais que constituem a paisagem e podemos ver para dentro das estruturas das rochas e saber por que são rígidas, por que podem cintilar, por que se podem fraturar e erodir, e o que contêm. Sabemos por que os metais podem ser moldados e estirados em fios e, através do nosso conhecimento da disposição dos seus átomos, por que alguns se dobram segundo a nossa vontade enquanto outros se partem. Compreendemos o jogo possível com as propriedades dos metais ao formar ligas e aços. Compreendemos as cores das pedras preciosas e por que podemos ver através do vidro, mas não através da madeira.

Através da química podemos desvendar e compreender os outrora impenetráveis mistérios do mundo natural. Podemos compreender o verde de uma folha e o vermelho de uma rosa, o aroma de uma erva e do feno acabado de cortar. Podemos compreender, de forma ainda hesitante, mas crescente, a intrincada e complexa rede de processos no mundo natural que constitui a impressionante e multifacetada propriedade a que chamamos vida. Começamos, ainda mais timidamente, a compreender os processos químicos no nosso cérebro que nos permitem perceber, maravilhar-nos e compreender.

Embora a química não trate do tecido último do mundo material — o conjunto de partículas fundamentais que pertence ao domínio da física de partículas — ocupa-se das suas combinações, os átomos, que possuem personalidades distintas. Através da química passámos a compreender as personalidades dos elementos, compreendendo por que têm essas personalidades através das estruturas dos seus átomos e por que entram em certas combinações, mas não noutras. Através da química — o âmago da própria química — sabemos como tirar partido dessas personalidades para construir moléculas e formas de matéria que talvez não existam em mais lado nenhum da nossa galáxia.

Compreendemos, através da química, os sabores dos alimentos, as cores dos tecidos, a textura da matéria, a fluidez da água, as mudanças de cor da folhagem na primavera, no verão e

no outono. Não precisamos, a cada momento das nossas vidas, de ativar a compreensão, pois entregar-nos ao prazer animal pode ser, por si só, uma forma de fruição, simplesmente gozando o agrado do que nos rodeia. Mas a química acrescenta profundidade a esse deleite, porque quando o estado de espírito nos conduz e a inclinação nos impele, podemos olhar para além dos prazeres superficiais do mundo e saborear o conhecimento de que sabemos como as coisas são.

# CAPÍTULO 7

---

## O SEU FUTURO

---

Aqui concentro-me nas tendências que estão atualmente a ocorrer na disciplina e nos materiais que começam agora a surgir no horizonte. Estes incluem tecidos modernos e substâncias que podem revolucionar a computação. Problemas conceptuais especiais — e oportunidades tecnológicas — estão a emergir à medida que a atenção dos químicos se volta para o nanomundo e estes trazem a computação para o coração da sua investigação.

**N**ovos elementos continuam a ser descobertos, atualmente ao ritmo de um por ano, aproximadamente, o que significa que a Tabela Periódica está a crescer, oferecendo, em princípio, mais espaço para os químicos explorarem. Infelizmente, todos estes novos elementos são múltipla e totalmente inúteis: são radioativos e tão instáveis que desaparecem em frações de segundo. Além disso, não são produzidos mais do que alguns átomos de cada vez, que de imediato se desfazem numa nuvem de partículas fundamentais.

Existem razões teóricas para suspeitar que, um pouco mais adiante na Tabela Periódica, nos elementos ainda por produzir com números atómicos próximos de 126 (em 2013, tínhamos chegado ao 116, livermório, com um ou dois outros ainda sem nome e cuja deteção não tinha sido confirmada, apenas insinuada através das brumas), surgirá aquilo a que se chama uma “ilha de estabilidade”, permitindo-lhes sobreviver significativamente mais tempo do que os elementos vizinhos. Contudo, é pouco provável que algum deles venha a ter aplicações úteis, exceto como bancadas de ensaio para teorias sobre a estrutura nuclear. Os químicos não têm razão para esperar que tragam qualquer novo impulso para a química.

Eles já têm muitos elementos com que trabalhar. Estão a ser desenvolvidas novas técnicas que prometem ampliar a sensibilidade, a precisão e o alcance das observações. A capacidade de detetar quantidades extraordinariamente pequenas de materiais é simultaneamente uma bênção e uma maldição. Conhecer a composição de uma amostra em detalhe exímio aproxima-nos da

compreensão; detetar vestígios que indiquem que bombas estiveram nas mãos de terroristas ajuda-nos a sobreviver; mas encontrar contaminantes por todo o lado — o que, num mundo em permanente agitação, será sempre inevitável — pode apenas confundir ou alarmar sem necessidade.

Técnicas importantes em desenvolvimento incluem aquelas que permitem estudar pequenos conjuntos de átomos e moléculas, evitando ter de inferir o seu comportamento a partir de observações feitas em amostras macroscópicas. Os químicos querem conhecer as intimidades da interação e transformação molecular, e poder examinar as propriedades das moléculas isoladamente ou no momento em que se aproximam e reagem, com ligações a afrouxar, átomos a libertarem-se e a reorganizarem-se em novas estruturas — este é o Santo Graal da química (da química física, pelo menos). Há já alguns anos que tem sido possível observar a evolução das moléculas em escalas temporais da ordem dos femtossegundos ( $10^{-15}$  s, 1/1.000.000.000.000.000s), e foram feitos progressos que estendem essa escala até aos attossegundos ( $10^{-18}$  s, mil vezes mais curto), momento em que até os eletrões ficam imóveis e a química se torna finalmente física.

Quando nos deparamos com grupos minúsculos de átomos, surgem questões interessantes e entram em cena regras especiais. Tomemos a água, por exemplo: qual é o mais pequeno cubo de gelo possível? Descobriu-se que são necessárias pelo menos 275 moléculas de água num aglomerado para que este manifeste propriedades semelhantes às do gelo, sendo que só por volta das 475 moléculas se torna verdadeiramente gelo. Isto corresponde a um cubo com cerca de oito moléculas de  $H_2O$  ao longo de cada aresta. A importância deste tipo de conhecimento reside no facto de nos ajudar a modelar o processo de formação de nuvens na atmosfera e a compreender como os líquidos gelam.

Quando lidamos com coleções diminutas de átomos a baixas temperaturas, temos de aceitar que o seu comportamento é regido pela mecânica quântica, e que devemos esperar propriedades estranhas. Toda a matéria, incluindo a matéria quotidiana, é também regida pela mecânica quântica, mas lidamos normalmente com números tão vastos de átomos — mesmo num simples

punhado de sal — que a estranheza se dilui e percebemos apenas médias, os comportamentos familiares da matéria comum. Estes novos estados de matéria que estão a começar a ser produzidos podem ter consequências de pouca relevância para a química — ou talvez não: podem ser perfeitos para armazenar dados e para o desenvolvimento da computação quântica.

Os químicos estão a contribuir enormemente para um campo emergente onde estão presentes pequenas quantidades de moléculas: o mundo da nanociência e da nanotecnologia. Os nanossistemas (do grego nano, anão) são compostos por entidades com cerca de 100 nm ( $10^{-7}$  m, 1/10.000 de milímetro) de diâmetro, situando-se na região intermédia entre moléculas individuais (cerca de mil vezes mais pequenas) e matéria macroscópica (cerca de mil vezes maior). As fronteiras são sempre locais fascinantes, e esta fronteira conceptual entre o grande e o pequeno não é exceção. As nanopartículas (repare como o prefixo pode ser afixado a inúmeros substantivos — haverá mais) são suficientemente pequenas para que os efeitos quânticos sejam relevantes, e para que a termodinâmica, outrora considerada uma teoria concluída, se veja agora perplexa e necessitada de ser repensada.

Aqui está terreno fértil para os químicos físicos explorarem e para formularem e refinarem as suas teorias convencionais, adaptando-as a estes materiais até agora pouco convencionais. Aqui também os químicos orgânicos e inorgânicos têm muito a contribuir, sobretudo na fabricação de nanomateriais, pois substâncias tanto orgânicas como inorgânicas podem ser concebidas para habitar o nanomundo. A fabricação pode ser top-down, quando as nanoestruturas são talhadas a partir de materiais macroscópicos, como um escultor a trabalhar o mármore; ou bottom-up, quando as nanoestruturas são construídas tijolo a tijolo. Este último método é particularmente interessante, pois a construção decorre tipicamente por auto-organização. Neste procedimento sem intervenção manual, constroem-se moléculas que, ao serem agitadas em conjunto, se agregam formando a nanoestrutura desejada — tal como talvez alguns de nós, em tempos, tenham sonhado que agitar um puzzle faria a imagem surgir espontaneamente, à medida que as peças se interligassem, poupando-nos ao enfadonho processo de montá-las uma a uma.

A nanotecnologia — o desenvolvimento e aplicação de nanomateriais — e a nanociência — o seu estudo geral — estão hoje no centro das atenções na química, e com razão, pois os nanomateriais prometem muito. Estão a ser criados institutos inteiros dedicados ao seu estudo. As possíveis aplicações dos nanomateriais atravessam várias disciplinas e já estão no cerne de muitas aplicações práticas. Por exemplo, apresentam características de colheita de luz superiores às das tradicionais células solares de silício e foram incorporados em sensores para detetar glucose no sangue. Materiais contendo cádmio foram amplamente investigados para este fim, embora existissem receios quanto à injeção deste elemento tóxico em corpos humanos; mas resultados recentes obtidos em primatas parecem atenuar esse receio. Já foram criados nanobastões, nanofios, nanofibras, nanobigodes, nanocintas e nanotubos, com potenciais aplicações em nanomáquinas e nanocomputadores.

A química está a preparar-se para desempenhar um papel crucial na miniaturização da computação. Vimos o impacto da redução de dimensão (e consumo energético) entre os primeiros computadores gigantescos dos anos 1950 e os pequenos, ubíquos e poderosos computadores atuais — e o efeito disso na sociedade e na vida quotidiana. Essa foi uma passagem da escala dos metros para a dos centímetros: uma diminuição cem vezes no comprimento, um milhão de vezes no volume e no peso, da escala de uma sala para a escala do bolso, acompanhada de um enorme aumento de poder computacional. Essa redução de tamanho, aliada ao aumento de capacidade e ao consequente impacto social, poderá repetir-se se o progresso atual no desenvolvimento da computação molecular vier a dar frutos.

Os processos computacionais dependem de duas características: memória e manipulação. A memória é relativamente simples de alcançar a nível molecular, bastando induzir numa molécula uma mudança estrutural que se mantenha e seja acessível a algum tipo de observação. Por exemplo, uma molécula pode ser levada a dobrar-se numa forma que represente 1 e numa forma diferente que represente 0. Há hoje disponíveis diversas mudanças conformacionais, como uma molécula em forma de anel deslizar para uma das extremidades de uma molécula em

forma de bastão, permanecendo aí. A manipulação é mais difícil, mas reduz-se essencialmente a obter uma dada saída a partir de uma dada entrada. A química, no entanto, versa justamente sobre saídas geradas por entradas, sob a forma de reações químicas — incluindo a emissão de luz quando dois reagentes se encontram.

A Natureza já resolveu o problema do armazenamento de dados com o desenvolvimento do ADN, e evoluiu métodos para extrair essa informação e convertê-la em organismos. As nossas memórias estão quimicamente codificadas de modos ainda desconhecidos no cérebro e constituem uma base de dados imensa, embora frágil e imperfeitamente armazenada. Moléculas de ADN têm sido utilizadas para realizar operações aritméticas simples e para “decidir” o tratamento necessário quando encontram uma molécula de proteína danificada. Cultivar computadores em vez de os fabricar continua a pertencer ao domínio da ficção científica, mas no horizonte já se vislumbram indícios dessa possibilidade.

+++

Uma evolução notável ocorrida recentemente foi a migração da química das três para as duas dimensões. O grafite, o material comum que preenche os lápis, é uma forma do elemento carbono em que os átomos de carbono formam folhas planas semelhantes a uma rede de arame de galinheiro que, quando há impurezas presentes, deslizam umas sobre as outras, deixando possivelmente uma marca numa página ou funcionando como lubrificante. As folhas individuais são designadas grafeno, e o facto de poderem ser destacadas do grafite sólido através de um procedimento muito simples ajudou a garantir a Andre Geim e Konstantin Novoselov o Prémio Nobel de 2010 (da Física).

O grafeno é atualmente visto como um grande prémio para físicos e, potencialmente, para engenheiros. É um dos materiais mais resistentes conhecidos, com um ponto de rutura 200 vezes superior ao do aço, sendo ao mesmo tempo muito leve, pesando menos de um grama por metro quadrado. Na citação do Nobel, assinala-se que “uma rede de descanso de 1 metro quadrado suportaria um gato de 4 kg, mas pesaria apenas tanto quanto um dos bigodes do gato”. As suas propriedades eletrónicas, térmicas e óticas extraordinárias são igualmente objeto de grande interesse,

permitindo, entre outras aplicações potenciais, a criação de altifalantes sem partes móveis, moldáveis a diferentes superfícies, e a obtenção, na prática, da destilação de vodka à temperatura ambiente, filtrando essencialmente a água.

Onde se situam os químicos perante este tesouro bidimensional? O grafeno está atualmente a ser desenvolvido para técnicas laboratoriais, como o seu uso como peneiro para separar moléculas de diferentes tipos (a produção de biocombustíveis é um dos objetivos) e na dessalinização (tornar potável a água do mar). Embora o grafeno propriamente dito não adsorva facilmente moléculas de gás, a sua superfície — praticamente toda a sua massa é superfície — pode ser modificada quimicamente para se tornar sensível a diferentes gases, cuja ligação altera as propriedades elétricas das folhas de grafeno subjacentes, possibilitando a deteção da sua presença.

Os químicos interrogam-se naturalmente sobre se este mundo maravilha bidimensional pode ser habitado por outros materiais e se esses materiais poderão ultrapassar algumas das deficiências do aparentemente milagroso grafeno. Novos materiais semelhantes ao grafeno foram produzidos eletroquimicamente, com compostos como sulfureto de molibdénio, sulfureto de tungsténio e materiais mais exóticos baseados em carboneto de titânio. Alguns destes materiais bidimensionais exibem propriedades semicondutoras, que o grafeno não possui, e já foram integrados em circuitos integrados minúsculos. O próprio grafeno é passível de modificação química, um dos procedimentos consistindo na sua oxidação para formar óxido de grafeno. Flocos deste material agregam-se em folhas de “papel de grafeno” que, esperam os cientistas dos materiais, poderão constituir a base de toda uma nova classe de materiais com propriedades elétricas, térmicas, óticas e mecânicas ajustáveis.

+++

Tão vastas são as aplicações dos novos materiais desenvolvidos por químicos em colaboração com cientistas dos materiais, físicos, biólogos e engenheiros que nada mais posso fazer senão permanecer nesta caverna das maravilhas digna de Aladino e apontar ao acaso, sabendo que inevitavelmente deixarei de fora um desenvolvimento ou exemplo crucial, mas esperando transmitir,

através de apenas alguns casos, a impressão de que a vida está a ser transformada por esta colaboração.

Assim, aponto para o vidro autolimpante. Esta inovação poupadora de trabalho baseia-se na fotoquímica e na compreensão das forças de atração ou repulsão entre moléculas, em particular da propriedade que torna uma superfície “hidrofóbica”, ou seja, repelente da água. Um vidro autolimpante típico é revestido com uma fina camada transparente de dióxido de titânio, que responde à luz solar decompondo quimicamente qualquer sujidade que tenha sido depositada sobre ele. A superfície repelente de água faz com que qualquer água — sobretudo a da chuva — lave os produtos dessa decomposição fotocatalisada sem deixar marcas sujas.

Posso apontar para os tecidos inteligentes. Os tecidos inteligentes podem brilhar com diferentes cores, talvez representando a distribuição de temperaturas do utilizador e, de forma rudimentar, o seu estado emocional. Ou podem responder às condições ambientais ou ao capricho do utilizador, mudando de aparência eletricamente. Para além de terem de ser apelativos, os tecidos devem também resistir às exigências da lavagem e ao desgaste de serem usados, amarrotados e vincados.

A catálise é extremamente importante, como já referi no âmbito industrial, mas é vital para a eliminação da poluição proveniente dos motores de combustão interna. O conversor catalítico agora incorporado em todos os nossos automóveis recorre a química altamente sofisticada, pois deve entrar em funcionamento rapidamente, logo que o motor é ligado quando ainda está frio (uma proporção significativa da poluição ocorre nesse momento), e continuar a atuar quando o motor está quente ao ponto de não poder ser tocado. Além disso, os catalisadores devem não só promover a redução dos óxidos de azoto a azoto inofensivo, como também a oxidação do monóxido de carbono a dióxido de carbono e completar a oxidação do combustível hidrocarbonado não queimado. E mais: precisam de responder às diferentes condições de funcionamento do motor, como a pobreza ou riqueza da mistura ar/combustível e os aumentos súbitos durante a aceleração. Tudo isto requer desenvolvimento por parte dos químicos.

Talvez em nenhum outro domínio a química moderna seja tão importante como no desenvolvimento de novos fármacos para combater doenças, aliviar a dor e melhorar a experiência da vida. A genômica, a identificação dos genes e das suas interações complexas na regulação da produção de proteínas, é central para os avanços atuais e futuros em farmacogenômica, o estudo de como a informação genética modifica a resposta de um indivíduo a um medicamento e oferecendo a perspectiva de uma medicina personalizada, em que um conjunto de fármacos é ajustado à composição genética de cada pessoa.

Ainda mais elaborada do que a genômica é a proteômica, o estudo do conjunto total de proteínas de um organismo — as entidades que operam na linha da frente da vida e sobre as quais a maioria dos fármacos atua. Aqui, a química computacional está em aliança essencial com a química médica, pois, se uma proteína implicada numa doença puder ser identificada e se se desejar interromper a sua ação, então a modelização computacional de possíveis moléculas capazes de invadir e bloquear o seu sítio ativo constitui o primeiro passo na descoberta racional de fármacos. Esta constitui igualmente outra via para a eficiência e eficácia da medicina personalizada.



Não quero dar a impressão de que os avanços na química estão inteiramente confinados às suas aplicações. Estas são, sem dúvida, chamativas e afetam-nos a todos. Contudo, os químicos também se dedicam ao trabalho fundamental de descobrir mais sobre a matéria e sobre como esta pode ser modificada. Cada vez mais, estão a familiarizar-se com o modo de funcionamento da Natureza ao nível molecular, aprendendo os seus métodos e tropeçando em características que podem ser surpreendentes e não ter qualquer aplicação imediata, exceto para aquilo que é o mais precioso dos bens: o conhecimento. A investigação fundamental é absolutamente vital para este propósito, pois conduz a descobertas imprevistas, compreensões inesperadas e aplicações imprevisíveis de brilho extraordinário.

Para introduzir um certo floreado final, menciono aqui uma única e singular descoberta recente, puramente académica: a

Tal é a alegria, o prazer intelectual, que a química moderna inspira. Espero que estas páginas tenham apagado, até certo ponto, aquelas memórias que possam ter contaminado a sua percepção deste assunto extraordinário e que tenha partilhado um pouco desse prazer.

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS																		
	Period 1																	
Group	1	2											13	14	15	16	17	18
	3 Li lithium	4 Be beryllium											5 B boron	6 C carbon	7 N nitrogen	8 O oxygen	9 F fluorine	10 Ne neon
2																		
3	11 Na sodium	12 Mg magnesium											13 Al aluminium	14 Si silicon	15 P phosphorus	16 S sulfur	17 Cl chlorine	18 Ar argon
4	19 K potassium	20 Ca calcium	21 Sc scandium	22 Ti titanium	23 V vanadium	24 Cr chromium	25 Mn manganese	26 Fe iron	27 Co cobalt	28 Ni nickel	29 Cu copper	30 Zn zinc	31 Ga gallium	32 Ge germanium	33 As arsenic	34 Se selenium	35 Br bromine	36 Kr krypton
5	37 Rb rubidium	38 Sr strontium	39 Y yttrium	40 Zr zirconium	41 Nb niobium	42 Mo molybdenum	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium	45 Rh rhodium	46 Pd palladium	47 Ag silver	48 Cd cadmium	49 In indium	50 Sn tin	51 Sb antimony	52 Te tellurium	53 I iodine	54 Xe xenon
6	55 Cs cesium	56 Ba barium	57 La lanthanum	72 Hf hafnium	73 Ta tantalum	74 W tungsten	75 Re rhenium	76 Os osmium	77 Ir iridium	78 Pt platinum	79 Au gold	80 Hg mercury	81 Tl thallium	82 Pb lead	83 Bi bismuth	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
7	87 Fr francium	88 Ra radium	89 Ac actinium	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113	114 Fv flerovium	115	116 Lv livermorium	117	118
			Lanthanoids (lanthanides)															
			6	58 Ce cerium	59 Pr praseodymium	60 Nd neodymium	61 Pm promethium	62 Sm samarium	63 Eu europium	64 Gd gadolinium	65 Tb terbium	66 Dy dysprosium	67 Ho holmium	68 Er erbium	69 Tm thulium	70 Yb ytterbium	71 Lu lutetium	
			7	90 Th thorium	91 Pa protactinium	92 U uranium	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium	

# GLOSSÁRIO

---

**Ácido** - Doador de prótons (ver ácido de Lewis).

**Álcali** - Uma base solúvel em água; uma solução aquosa de uma base.

**Aminoácido** - Um composto orgânico de fórmula  $\text{NH}_2\text{CHR}\text{COOH}$ .<sup>1</sup>

**Análise** - A identificação de substâncias e a determinação das suas quantidades e concentrações.

**Anião** - Um átomo ou grupo de átomos com carga negativa.

**Átomo** - A menor partícula de um elemento; uma entidade composta por um núcleo rodeado de elétrons.

**Base** - Recetor de prótons (ver base de Lewis).

**Ligação** - Um par de elétrons partilhado situado entre dois átomos.

**Hidrato de carbono** - Um composto orgânico de fórmula típica  $(\text{CH}_2\text{O})_n$ .

**Catálise** - A aceleração de uma reação química por uma espécie que não sofre alteração líquida.

**Catião** - Um átomo ou grupo de átomos com carga positiva.

**Reação em cadeia** - Uma reação na qual uma molécula, ião ou radical ataca outra, o produto ataca outra, e assim sucessivamente.

**Complexo** - Um grupo de átomos constituído por um átomo metálico central ao qual estão ligados ligantes.

**Composto** - Uma combinação específica de elementos ligados entre si.

**Difração** - Interferência entre ondas causada por um objeto no seu percurso.

**Dupla ligação** - Dois pares de elétrons partilhados situados entre dois átomos.

**Eletroquímica** - A utilização de reações químicas para gerar eletricidade e da eletricidade para produzir transformação química.

**Eletrólise** - Realizar uma reação química através da passagem de uma corrente elétrica.

**Elétrão** - Uma partícula subatômica com carga negativa.

**Eletrófilo** - Uma espécie que é atraída para regiões ricas em elétrons (negativas).

---

<sup>1</sup> R denota um grupo de átomos, como por exemplo  $-\text{CH}_3$ , ou algo mais complexo.

**Substituição eletrófila** - Uma reação de substituição na qual um dos reagentes é um eletrófilo.

**Elemento** - Uma substância que não pode ser decomposta quimicamente em substâncias mais simples; uma substância composta por um único tipo de átomo. Para uma lista de elementos e respectivos símbolos, ver a Tabela Periódica precedente.

**Genômica** - A identificação dos genes e da sua complexa interação na regulação da produção de proteínas.

**Química verde** - O objetivo de minimizar o impacto dos processos de fabricação químico no ambiente através de diretrizes rigorosas relativas ao uso de materiais e à eliminação de resíduos.

**lão hidrônio** -  $\text{H}_3\text{O}^+$ .

**lão hidróxido** -  $\text{OH}^-$ .

**Intermediário** - Ver Intermediário de reação.

**lão** - Um átomo ou grupo de átomos com carga elétrica (ver catião e anião).

**Isótopos** - Átomos com núcleos que possuem o mesmo número atômico (número de prótons) mas diferentes números de nêutrons.

**Ácido de Lewis** - Um aceitador de um par de elétrons.

**Base de Lewis** - Um doador de um par de elétrons.

**Reação ácido-base de Lewis** - Uma reação da forma  $\text{A} + \text{:B} \rightarrow \text{A-B}$  entre um ácido de Lewis e uma base de Lewis.

**Ligante** - Um grupo de átomos ligado a um átomo metálico central num complexo.

**Par isolado** - Um par de elétrons que não participa diretamente na formação de ligações.

**Mistura** - A junção de substâncias sem formação de novas ligações químicas.

**Molécula** - A menor partícula de um composto; uma combinação discreta de átomos numa disposição definida.

**Monômero** - Uma pequena molécula usada numa reação de polimerização.

**Nucleófilo** - Uma espécie que é atraída para regiões pobres em elétrons (positivas).

**Substituição nucleófila** - Uma reação de substituição na qual um dos reagentes é um nucleófilo.

**Oxidação** - A remoção de elétrons de uma espécie; reação com oxigênio.

**Fotão** - Uma partícula de radiação eletromagnética.

**Polímero** - O produto de uma reação de polimerização.

**Polimerização** - A união de pequenas moléculas para criar cadeias longas.

**Produto** - O material produzido por uma reação química.

**Proteína** - Um composto complexo formado por aminoácidos.

**Proteômica** - O estudo do conjunto total de proteínas de um organismo.

**Protão** - O núcleo de um átomo de hidrogénio.

**Radical** - Uma espécie com pelo menos um eletrão desemparelhado.

**Reagente** - A substância inicial numa reação química específica.

**Intermediário de reação** - Uma espécie distinta dos reagentes e dos produtos, proposta como participante num mecanismo de reação.

**Reagente** - Uma substância usada como reagente em diversas reações químicas.

**Reação redox** - Uma reação que envolve oxidação de uma espécie e redução de outra; uma reação de transferência de eletrões.

**Redução** - A adição de eletrões a uma espécie.

**Sal** - Um composto iónico formado pela reação de um ácido com uma base.

**Soluto** - Uma substância dissolvida.

**Espécie** - Usado aqui para designar um átomo, molécula ou ião.

**Espectroscopia** - A observação da absorção ou emissão de radiação por uma amostra.

**Reação de substituição** - Uma reação na qual um átomo ou grupo de átomos é substituído por outro já presente numa molécula.

**Supercondutividade** - A capacidade de conduzir eletricidade sem resistência.

**Síntese** - A criação de substâncias a partir de componentes mais simples.

**Titulação** - A determinação da concentração de um ácido (ou base) através da medição do volume de um álcali (ou ácido) necessário para o neutralizar.

**Metal de transição** - Um elemento pertencente aos Grupos 3 a 11 da Tabela Periódica.