

ATRAÇÃO enigmática

Quando Isaac Newton se inspirou na queda de uma maçã para elaborar a lei da gravidade, o físico e matemático inglês estava bastante confiante de que esse fenômeno acontecia sempre do mesmo modo: a maçã caía para baixo, em direção ao centro da Terra. Qual não seria a surpresa de Newton se, em uma ocasião ou em outra, a fruta caísse, por exemplo, para cima?

O assombro que ele provavelmente demonstraria talvez fosse semelhante ao dos pesquisadores que tentam entender o comportamento no mundo microscópico de partículas eletricamente carregadas (íons) diluídas na água. A teoria quase centenária sobre as interações dessas partículas sugere que elas deveriam sempre se manter afastadas da região em que a água encontra o ar, a chamada interface água-ar. Mas experimentos feitos em laboratório e simulações em computador indicavam que isso não acontecia com determinados íons – em especial os de carga elétrica negativa, que parecem atraídos para essa região.

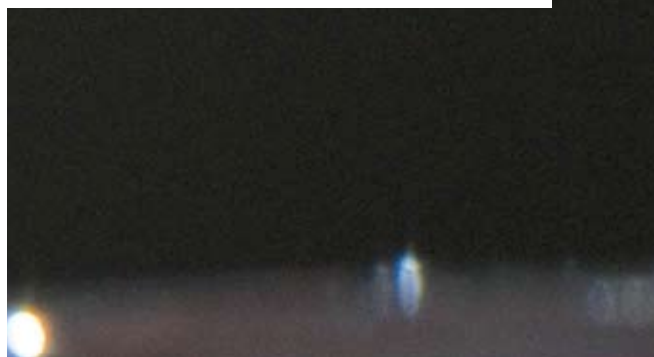
Após um século, o mistério começa finalmente a ser desfeito graças a uma nova teoria desenvolvida sob o comando do físico americano-brasileiro Yan Levin, pesquisador da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). Em trabalhos publicados no final de 2009 na prestigiosa revista científica *Physical Review Letters*, Levin e seu grupo demonstram que é possível restabelecer a capacidade de previsão teórica do comportamento dessas partículas se os pesquisadores deixarem de tratá-las da forma simplista e prática, como esferas com carga positiva ou negativa localizada em seu centro. Ao considerá-las pequenas esferas com carga elétrica central, os teóricos conseguiram prever uma gama variada de comportamentos dessas partículas. Mas restavam enigmas como a atração seletiva para a superfície da água.

Na natureza, porém, os íons não são esferas rígidas como bolas de bilhar. O que transforma átomos ou moléculas eletricamente neutros em íons é a perda ou ganho de partículas de carga elétrica negativa (elétrons) – quando, no balanço geral, há mais cargas positivas do que negativas o íon apresenta carga positiva; e no caso de haver mais cargas negativas do que positivas o íon tem carga elétrica negativa.

O que complica a história é que os elétrons em geral não se comportam como partículas pontuais. Eles obedecem

Nova teoria ajuda a explicar comportamento de íons diluídos em água

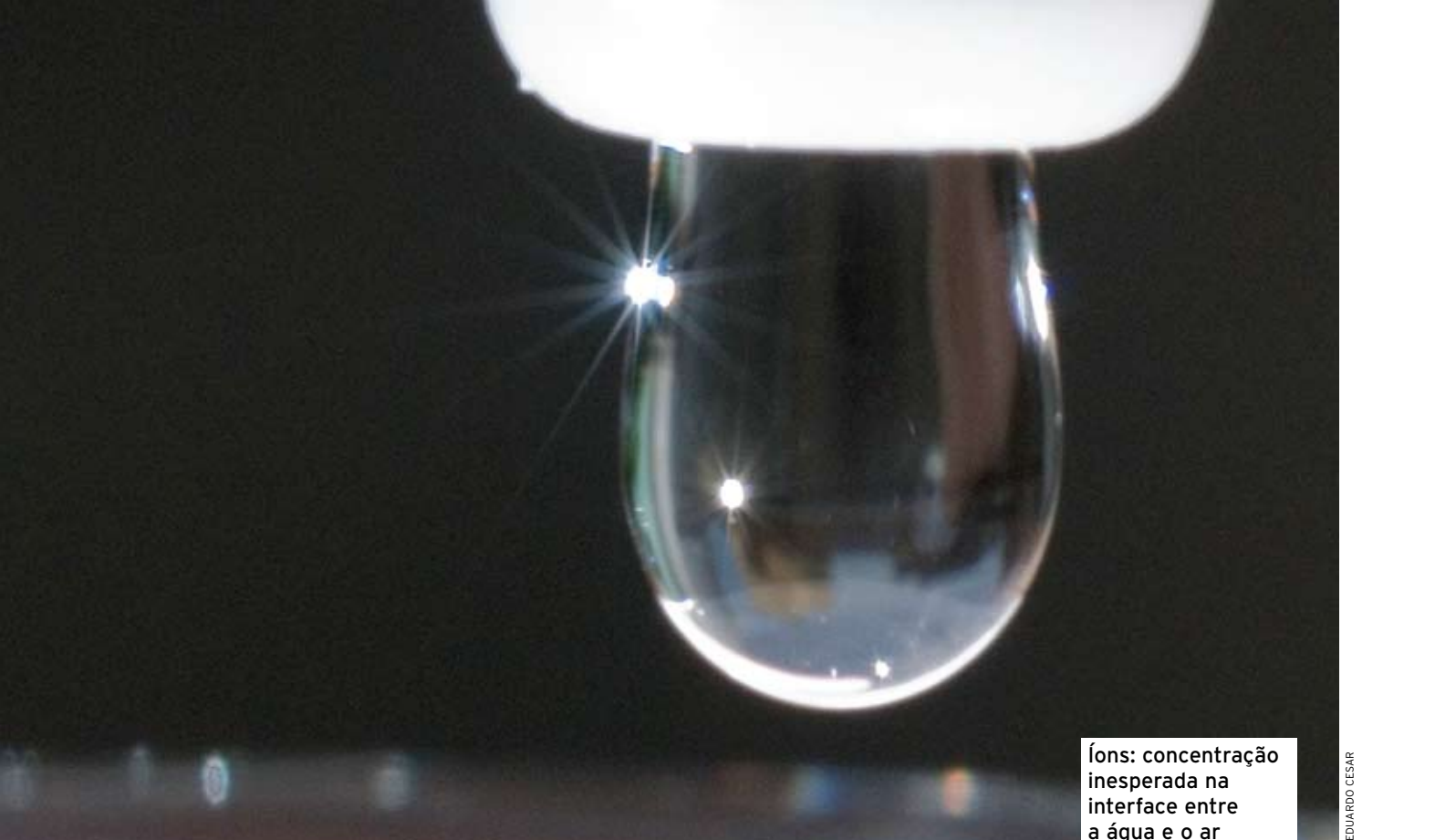
SALVADOR NOGUEIRA



a regras da teoria quântica, a física do mundo submicroscópico, que muitas vezes contrariam a intuição.

O que isso quer dizer? É que eles se comportam como se fossem uma nuvem difusa ao redor do átomo ou da molécula. Alguém que tente medir a posição de um elétron terá mais chance de encontrá-lo em determinada região da nuvem. Mas a definição precisa de onde ele está só acontece quando a partícula é de fato observada. Antes da medição, é como se ela estivesse em todos os lugares possíveis ao mesmo tempo – por isso os físicos dizem que o elétron é uma onda de probabilidade.

Mas esses detalhes não devem nos incomodar, uma vez que até hoje os pesquisadores que trabalham com a física quântica não sabem interpretar o que a teoria realmente significa no que diz respeito à natureza das partículas e ao mundo em suas menores escalas. Apesar de pouco compreensível, a física quântica representa com bastante precisão o que se passa no mundo das partículas. Com ela é possível calcular as ondas de probabilidade que se ajustam perfeitamente aos resultados obtidos em experimentos.



Íons: concentração inesperada na interface entre a água e o ar

EDUARDO CESAR

A interpretação do que acontece com os íons na interface água-ar começou a mudar quando Yan Levin decidiu verificar o que aconteceria caso se considerasse que, em vez de localizada no centro do íon como se imaginava, a carga se distribuisse de forma desigual pela superfície do íon – efeito conhecido como polarizabilidade. Essa distribuição desigual é produzida pelo campo elétrico gerado pelas moléculas de água – cada átomo de hidrogênio de uma molécula tem carga positiva e se conecta ao oxigênio, com carga negativa, de outra, criando ligações químicas (pontes de hidrogênio). Os íons perturbam essas ligações gerando uma competição entre os dois efeitos.

Números compatíveis - No caso dos íons grandes e altamente polarizáveis, as pontes de hidrogênio prevalecem e empurram esses íons para a interface água-ar, o oposto do que previam as teorias antigas, explica Levin. Foi exatamente isso que ele observou nos experimentos em laboratório, em particular com íons negativos produzidos pela dissolução de sais contendo elementos químicos halogênios (cloro, bromo, iodo e flúor).

Os cálculos teóricos produzidos por Levin e seus colegas correspondem perfeitamente às observações experimentais. Eles já fizeram as contas para os íons produzidos por esses sais na interface água-ar e agora pretendem trabalhar com ácidos, para ver se o efeito é similar. O grupo também pretende investigar nos próximos meses o efeito de soluções de sais em interação com proteínas. Sabe-se que, no caso de proteínas diluídas em água, o comportamento de moléculas na interface água-proteína pode ser bem parecido com o que ocorre nas interfaces entre água e óleo ou água e ar. Esse conhecimento será importante para compreender por que determinados sais induzem a precipitação (e outros a estabilidade) das proteínas, moléculas responsáveis por praticamente tudo o que ocorre no metabolismo dos seres vivos.

Na opinião de Levin, caso se mostrem corretas, suas equações podem ser aplicadas em situações bem diversas. É possível, por exemplo, que elas ajudem a compreender certas nuances da evolução da vida na Terra. “Houve momentos na história do planeta em que aconteceram extinções em massa nos oceanos,

que podem ter se dado pela diminuição de íons nos mares”, lembra. “Com a nova teoria, também poderemos investigar qual é o limite antes que as proteínas se precipitem por causa do sal.”

Outro fenômeno que pode ser explicado por essa nova teoria é a degradação do ozônio na baixa atmosfera. Acredita-se que, próximo à superfície dos oceanos, gotículas (aerossóis) de água atuem na destruição desse gás – e na consequente redução de sua concentração. De acordo com a teoria anterior sobre o comportamento dos íons, a degradação do ozônio nessas regiões ocorreria em taxas muito menores que as observadas na realidade. Levin acredita que, também nesse caso, a teoria proposta por seu grupo apresente resultados mais próximos dos obtidos experimentalmente. ■

Artigos científicos

1. LEVIN, Y. Polarizable ions at interfaces. *Physical Review Letters*. v. 102. p. 1478031-34. 10 abr. 2009.
2. LEVIN, Y. *et al.* Ions at the air-water interface: an end to a hundred-year-old mystery? *Physical Review Letters*. v. 103, p. 2578021-24. 18 dez. 2009.