

## A fórmula da água

Paulo Netz e Marcia Barbosa

Marcia Barbosa está apresentando experimentos de divulgação da sua área de pesquisa durante o sábado de Portas Abertas da UFRGS quando é interpelada por um menino. Ele deve ter uns dez anos e diz incisivamente: eu sei a fórmula da água,  $H_2O$ . A frase, aparentemente intempestiva, estava totalmente contextualizada, pois naquela semana uma autoridade do governo havia usado a fórmula da água como exemplo de conhecimento mais banal que todos os estudantes deveriam saber.

Marcia sorri e explica que muito mais importante que a fórmula memorizada roboticamente era conhecer a forma da água.

Qual é a forma da água? Muitas das moléculas pequenas como  $CO_2$ ,  $H_2$ ,  $O_2$  tem uma distribuição atômica linear, um átomo ao lado do outro formando uma linha. Este não é o caso da água. Nela os átomos se organizam em forma de V com o oxigênio no centro. A origem desta organização é o fato do oxigênio ter oito elétrons (e oito prótons) que se distribuem com dois elétrons no primeiro nível de energia, sobrando somente seis para o segundo nível que comporta oito elétrons. Para preencher sua nuvem eletrônica o oxigênio realiza um negócio, Ele pede para dois hidrogênios que compartilhem com ele o único elétron que cada um tem oferecendo a cada um dos hidrogênios um elétron seu para compartilhar. Na média, o oxigênio fica com oito elétrons no último nível e cada hidrogênio com dois elétrons, fechando o seu nível mais baixo. Este tipo de negociação gera uma ligação denominada de covalente. O oxigênio fica instantaneamente com oito elétrons divididos em grupos de dois (cada elétron em sub nível de energia tem um spin). Os elétrons não pareados pelo spin se repelem. Assim são quatro pares que se repelem muito em torno do oxigênio, portanto ficam o mais longe possível, ou seja, apontam para os vértices de um tetraedro rodeando o oxigênio. Dois destes pares são os ligados aos hidrogênios e, portanto, estão localizados no final de um V.

Este formato que parece meio trivial tem consequências fascinantes. Em primeiro lugar, como o oxigênio, por causa de sua estrutura eletrônica, tem mais afinidade em receber e ficar com elétrons (dizemos que ele tem mais eletronegatividade), o compartilhar de elétrons foi vantajoso para o oxigênio, pois os elétrons ficam mais próximos dele do que dos hidrogênios. A região onde o oxigênio se localiza fica mais negativa por ter mais elétrons e à que os hidrogênios se localizam fica mais positiva, gerando uma polarização.

Quais são as consequências da forma em V da água? A polarização descrita acima faz com que uma molécula de água se ligue a outra através de algo chamado ligação de hidrogênio. Não é tão forte quanto a ligação covalente, mas é forte o suficiente para fazer com que a quantidade de calor necessária para transformar a água do estado líquido para o vapor seja grande, fazendo com que a água esteja no estado líquido na maior parte do nosso planeta. Moléculas do mesmo tamanho que a água como  $CO_2$ ,  $O_2$  e  $N_2$  estão no estado gasoso em nosso planeta. Outro aspecto importante nestas ligações de hidrogênio da água é que uma dada molécula de água pode, em média, compartilhar por doação seus hidrogênios com outras duas moléculas e interagir com os hidrogênios de duas outras. Assim, tendo em média quatro ligações de hidrogênio, a água pode formar um líquido peculiar, bastante estruturado, como uma rede tridimensional. Esta estruturação, a polarização e as ligações de hidrogênio tornam a água muito interessante para carregar sais, hidratar proteínas e interagir com diversos compostos. Compreender a água é usar o solvente mais importante do planeta.

Apesar de anos de pesquisa, a água ainda surpreende cientistas de todo o mundo como Paulo Netz da UFRGS que passados vinte anos olhando para esta molécula não se cansa de encontrar novas propriedades surpreendentes que explicam a vida e permitem produzir avanços tecnológicos. A água é imprescindível para a vida, pelo menos para aquela que conhecemos no nosso planeta. Ela fornece o meio no qual ocorrem os complexos processos bioquímicos. Mas nesses processos a água não é coadjuvante, mas sim tem um dos papéis principais. As proteínas, por exemplo, para o seu funcionamento, precisam adotar uma estrutura complexa peculiar – um enovelamento. Este enovelamento – que depende do tipo de proteína – é mediado pelas interações que as diferentes porções (os resíduos de aminoácidos da proteína) tem com a água, alguns favoráveis (hidrofílicos = “aqueles que gostam da água”), outros desfavoráveis (hidrofóbicos = “aqueles que não gostam da água”). Também a famosa estrutura de dupla fita do DNA tem, como uma das suas causas microscópicas, as interações com as moléculas de água. Uma das porções do DNA – as bases nitrogenadas – formam pares entre si (com ligações de hidrogênio) e a molécula de DNA se dobra e torce expulsando a água das regiões hidrofóbicas e aumentando a exposição das regiões hidrofílicas. A estrutura das membranas celulares também pode ser compreendida pelas interações que as diferentes partes (hidrofílicas ou hidrofóbicas) dos fosfolipídios – principais constituintes das membranas celulares animais – fazem com as moléculas de água.

A água também é imprescindível para a vida por uma outra razão: a água na fase sólida (o gelo) é mais leve do que a água na fase líquida. Assim, o gelo flutua. São pouquíssimas as substâncias que tem este tipo de comportamento. Se o gelo afundasse em vez de flutuar, as glaciações que ocorreram na história do nosso planeta possivelmente teriam congelado inteiramente toda a água da terra, e a vida talvez nem tivesse tido a chance de surgir.

A beleza e complexidade da água nos ensina que, para construir um país protagonista de seu futuro, o que realmente importa não é saber recitar fórmulas, mas compreender e dominar a ciência, por exemplo na singela e poderosa a forma da água.