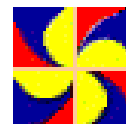




# CURIOSIDADES DA FÍSICA

José Maria Filardo Bassalo

[www.bassalo.com.br](http://www.bassalo.com.br)



---

## As Forças de van der Waals Revisitadas.

Em verbete desta série, vimos que o físico holandês Johannes Diderick van der Waals (1837-1932; PNF, 1910), desenvolveu a **Teoria Cinética dos Gases Reais** (TCGR), em 1873, em sua Tese de Doutorado intitulada **Over de Continuïteit van den Gas-en Vloeïstoofstand** (“Sobre a Continuidade dos Estados Líquido e Gasoso”) e defendida na *Universidade de Leiden*, na qual demonstrou que a **Equação dos Gases Ideais** (EQI) [ $PV = RT$ , onde  $P$  é a pressão,  $V$  o volume,  $T$  a temperatura absoluta e  $R$  a **constante universal dos gases**, para o caso de 1 mol (molécula-grama ou molécula quilograma)], que foi formulada pelo engenheiro e físico francês Emile Clapeyron (1799-1864), em 1834 (*Journal de l'École Polytechnique* **14**, p. 190)] poderia ser deduzida da **Teoria Cinética dos Gases Ideais** (TCGI), ao assumir que as moléculas não apresentam volume próprio e que não existem forças atrativas entre elas. Contudo, no caso da TCGR, ele mostrou que a EQI deveria ser reformulada por intermédio de dois parâmetros para considerar o tamanho e a força entre as moléculas. Assim, encontrou a famosa **Equação de van der Waals**:  $(P + a/V^2)(V - b) = RT$ , onde a constante  $a$  decorre da colisão entre as moléculas (pressão interna) e a constante  $b$  é o **co-volume** ou volume próprio das moléculas. Para detalhes dessa tese de Waals ver sua *Nobel Lecture: The Equation of State for Gases and Liquids* (12 de dezembro de 1910).

Com o desenvolvimento da Mecânica Quântica e sua aplicação à Química Atômica e Molecular, ocorrida a partir da década de 1930 (ver verbetes nesta série), verificou-se que as **Forças de van der Waals** (FvdW) (envolvidas na correlação do movimento de muitos elétrons e que provoca a dispersão da energia deles, como mostra a Mecânica Quântica de Muito-Elétrons), são da ordem de  $10^{-7}$  newtons (N). Hoje, acredita-se que a FvdW desempenha um papel fundamental na determinação da estrutura, da estabilidade e da função de uma ampla variedade de

moléculas e materiais nanométricos. Assim, segundo o físico russo Alexandre Tkatchenko (n.1980) [*Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft* (F-H-I-M-P-G), Berlin; *Physics and Materials Science Research Unit, University of Luxembourg*, Luxemburgo], o caso mais simples da análise de duas cadeias de átomos poderia ser feita identificando **pontos** nessas cadeias, que são atraídos uns pelos outros pelas FvdW, e calcular a energia de pares desses pontos e somá-las. No entanto, para distâncias realísticas entre materiais em **nanoescala**, isso não é verdade, pois em vez de partículas, a de se considerar esses **pontos** como **ondas**. Isso afeta drasticamente a maneira como pensamos sobre essas interações onipresentes, concluiu Tkatchenko. Note-se que essa conclusão decorreu de um experimento [cujo resultado foi publicado em 11 de março de 2016 (*Science* **351**, p. 1171) (**Wavelike Charge Density Fluctuations and van der Waals Interactions at the Nanoscale**)] que Tkatchenko comandou, em colaboração com os físicos, os italianos Alberto Ambrosetti (F-H-I-M-P-G; *Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università degli Studi di Padova*) e Nicola Ferri (F-H-I-M-P-G), e o químico-físico norte-americano Robert A. DiStasio Junior (*Department of Chemistry and Chemical Biology, Cornell, Ithaca*). (Inovações Tecnológicas, 18/03/2016).

Segundo esses autores (*Abstract*), o referido experimento envolveu *interações não-covalentes* entre diversos conjuntos de materiais e sistemas biológicos com diferentes medidas, topologias e polarizabilidades, em **nanoescala** [10 – 20 nm (1 nm ~ 10<sup>-9</sup> m)] e, segundo o paradigma científico vigente, esperavam descrevê-lo por intermédio da **força de atração pontual** (FvdW:  $F \propto 1/r^p$ , sendo  $p = 6$ , para longas distâncias eletrônicas), ou seja, por intermédio da atração entre *nanoestruturas polarizáveis*. Porém, eles tiveram uma surpresa, pois a descrição pretendida só poderia ser qualitativamente correta [com *exatidão química* (EQ) exigida para a descrição de sistemas complexos com milhares de átomos], se considerassem a **natureza ondulatória** das flutuações das densidades de carga. É interessante registrar que, no caso da ligação entre moléculas orgânicas pequenas, tem-se: EQ = 1 kilocaloria/mol ([en.wikipedia.org/Computational\\_chemistry](http://en.wikipedia.org/Computational_chemistry)). Em vista disso, os cientistas envolvidos no experimento citado, concluíram que a **lei**

**de potência** da FvdW deverá ser conceitualmente mudada (novo paradigma físico?) no caso das **interações não-covalentes em nanoescala**, interações essas que constituem a base da construção de materiais nanométricos (importantes para o desenvolvimento de uma nova era da *computação pós-silício* e que é caracterizada pela busca de um *novo material* para a junção de dois plásticos) e que necessita, por exemplo, da união entre o **grafeno** e a **molibdenita**.

É interessante ressaltar que o **grafeno** é um material bidimensional (na forma hexagonal de um “favo de mel”), com a espessura de um átomo (1 angström  $\sim 10^{-10}$  m), composto por uma lâmina de **grafite** [forma cristalina (3D) de carbono (C)], e que foi isolado, em 2004 (*Science* **306**, p. 666), pelos físicos, o russo-inglês Konstantin Sergeevich Novoselov (n.1974; PNF, 2010) e o holandês Andre Konstantinov Geim (n.1958; PNF, 2010), com a colaboração de S. V. Morozov, D. Jiang, Yuanbo Zhang, S. V. Dubonos, Irina V. Grigorieva e A. A. Firsov, ao esfoliaram o **grafite** com um tipo de fita adesiva e conseguiram, desse modo, obter monocamadas de **grafeno**.

Por sua vez, em 30 de janeiro de 2011 (*Nature Nanotechnology* - **online**), B. Radisavijavic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti e Andras Kis, pesquisadores da *Escola Politécnica de Lausanne*, na Suíça, anunciaram que haviam descoberto que a **molibdenita** [dissulfeto de molibdênio ( $\text{MoS}_2$ )], permite também a obtenção de monocamadas atômicas usando a mesma técnica da descoberta do **grafeno**.

Concluindo este verbete, é interessante destacar que, em 13 de maio de 2016 (*Nature Communications* **7**, a.n. 11559), Shigeki Kawai, Adam S. Foster, Torbjörn Björkman, Sylwia Nowakowska, Jonas Björk, Filippo Federici Canova, Lutz H. Gade, Thomas A. Jung e Ernst Meyer anunciaram que haviam medido a FvdW entre pares de átomos de gases nobres: argônio-xenônio (Ar–Xe), kriptônio-xenônio (Kr–Xe) e xenônio-xenônio (Xe–Xe) usando um **microscópio de força atômica (microscópio de tunelamento de varredura)** em baixa temperatura, sendo o Xe funcionando como a ponta do mesmo (ver verbete nesta série).



**ANTERIOR**

**SEGUINTE**