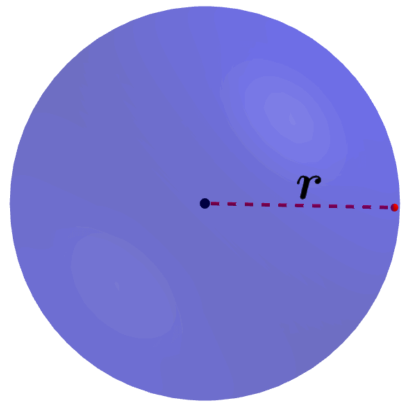
Pi nas ciências

Pedro Sousa Lacerda

https://doi.org/10.29327/2366212.2024.1-16

Raio de van der Waals



Existem vários modelos atômicos, os quais geralmente incluem um núcleo de prótons e nêutrons orbitados por elétrons de uma nuvem de elétron denominada eletrosfera. Simplificadamente, essa eletrosfera que envolve o átomo é modelada como uma esfera cujo raio atômico é conhecido como raio de van der Waals (vdW). A partir deste raio, é possível calcular o volume do átomo. No entanto, neste modelo, para moléculas compostas por mais de um átomo, há sobreposição entre as nuvem de elétrons dos átomos ligados covalentemente, devido ao compartilhamento de elétrons de ambos os átomos. Por exemplo, o raio de vdW do átomo de Oxigênio (O) é 152 pm (picômetros), portanto seu volume é $V = \frac{4}{3}\pi 152^3$ picômetros cúbicos (pm^3). **Fóruma:** $V = \frac{4}{3}\pi r^3$.

Estrutura atômica de α-hélices

Algumas macromoléculas, como polímeros peptídicos (peptídeos e proteínas) e ácidos nucleicos, por vezes, apresentam uma estrutura atômica secundária tridimensional helicoidal. No exemplo da figura, se encontra uma α-hélice com cada aminoácido representado por uma letra. A estrutura é polipeptídica consta com um raio interno de 0,23 nanômetros (nm) e sua morfologia apresenta um lado externo hidrofílico que é exposto ao solvente aquoso (aminoácidos vermelhos e pretos), e um lado externo hidrofóbico voltado para o interior do polímero (aminoácidos azuis). A quantidade de aminoácidos por cada volta da α-hélice (2π ou 360º) é de aproximadamente 3,6 aminoácidos com a distância de 0.54 nm entre Cα (Carbono alfa) de mesmo grau, implicando os 18 aminoácidos na formação de uma hélice de 5 voltas e altura de 27 nm.

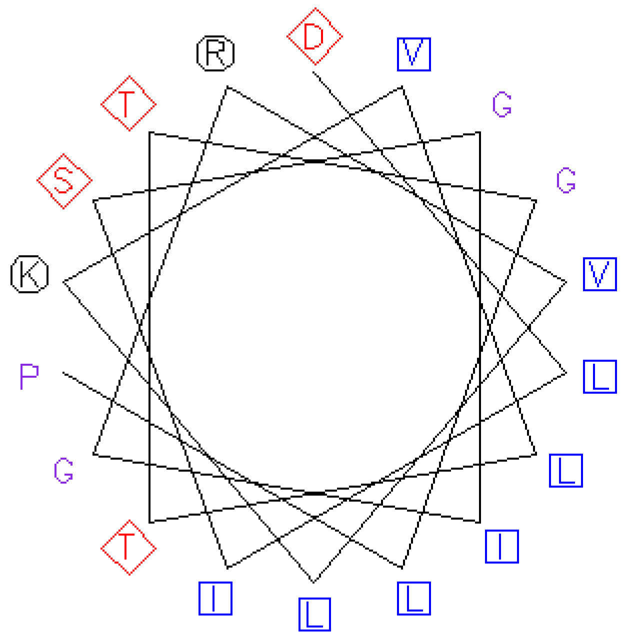
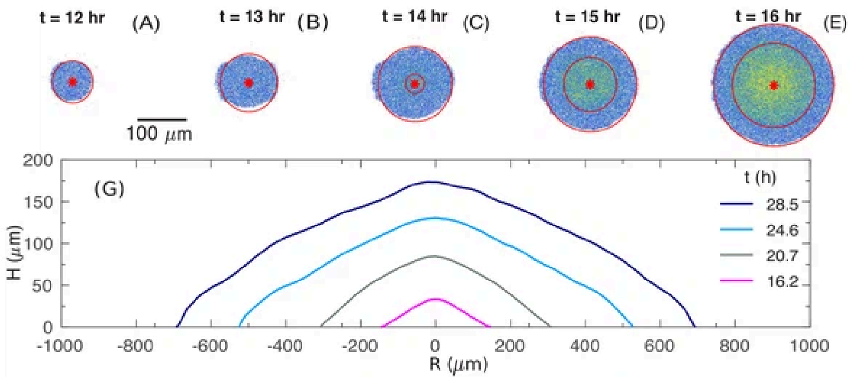


Figura <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Helical_wheel.png>

Colônia de microorganismos

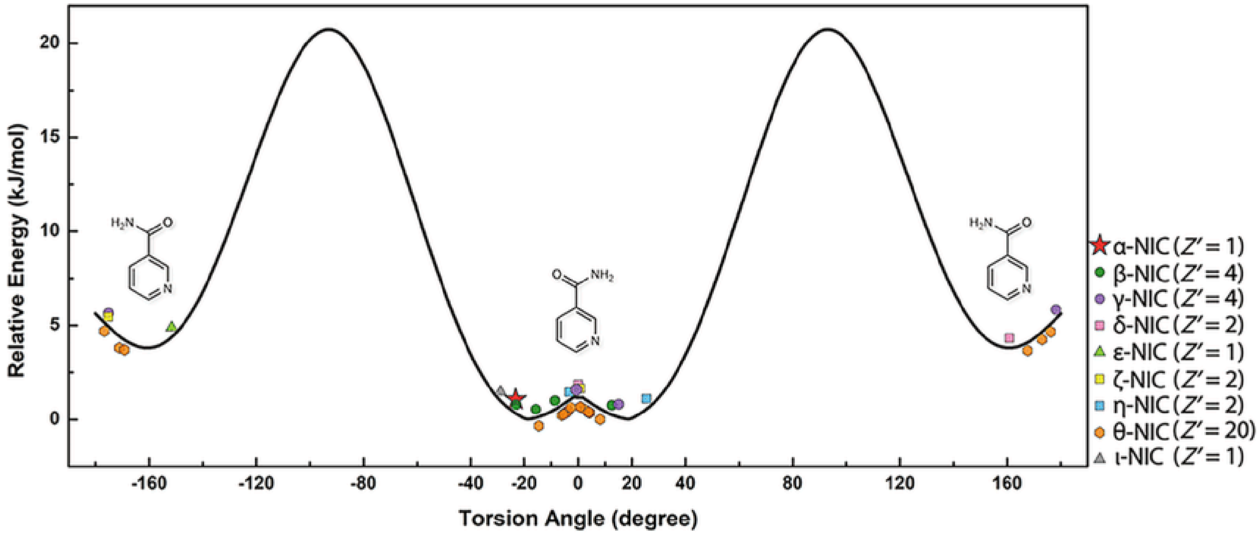


Microrganismos como a bactéria E. coli, quando inoculados em meio de cultivo apropriado, apresentam um padrão de difusão que se multiplica pela divisão celular num processo denominado de colonização. Caso o meio seja uniforme, o processo ocorre de forma circular a partir do ponto de inoculação, que é o centro do círculo (raio R=0). No entanto, a formação da colônia não se dá apenas horizontalmente, mas também se dá verticalmente em camadas, formando um cone com topo em R=0 e com a segunda camada perceptível apenas após o tempo t=14h. O volume da colônia, que é cônica, em t=16h (altura H≈45μm, R≈175μm) pode ser aproximado pela fórmula $V = \frac{45\times175^2}{3}\pi$ micrômetros cúbicos (μm^3).

Fórmula: $V = \frac{hr^2}{3}\pi$.

Figura <https://doi.org/10.7554/eLife.41093>

Ligações rotacionáveis



A exploração da rotação de ligações covalentes simples permite conhecer o cenário da energia intramolecular a fim de identificar as conformações mais favoráveis. Transitar entre estas conformações exige a aplicação de energia externa no eixo de rotação de modo que vença as barreiras energéticas (cumes), rotacionando para outra conformação favorável (mínimo), até uma rotação completa de 2π (360º). O gráfico ilustra o cenário energético de 9 conformações da nicotinamida (NIC, uma forma de vitamina B3), variando o ângulo θ, com algumas no mínimo global ($\theta \approx 0$) e outras no mínimo local [$\theta \approx (\pi = 180º)$].

Figura <https://doi.org/10.1038/s42004-020-00401-1>

Mecânica orbital

Pela lei newtoniana gravitacional, considerando a massa m de um planeta orbitando de modo circular (raio r igual ao semi-eixo maior igual ao semi-eixo menor), em torno a estrela de massa M, com a constante gravitacional G, temos a força centrípeta com velocidade angular ω:

$$mr\omega^2 = G\frac{mM}{r^2}.$$

Podemos reescrever a velocidade angular ω em termos do período orbital T, também conhecido como o tempo que um objeto astronômico leva para orbitar um outro objeto principal, como um planeta que tem como foco uma estrela (objetos aproximadamente esféricos):

$$\omega = \frac{2\pi}{T}$$

Desprezando a massa do planeta $m \ll M$ em relação à estrela, T está relacionado com a constante gravitacional G e com a massa M da estrela pela fórmula:

$$T = \sqrt{\frac{(2\pi)^2}{GM}r^3}.$$

Para a Terra, com $G \approx 6.674 \times 10^{-11} \frac{Nm^2}{kg^2}$, com a massa do Sol $M \approx 1.9885 \times 10^{30}\, kg$, e semieixo maior $r \approx 1.496 \times 10^{11}\, m$, temos o período $1\, T = 365.25\, dias$:

$$T \approx \sqrt{\frac{(2\pi)^2}{6.674\times10^{-11}\times1.9885\times10^{30}}(1.1496\times10^{11})^3} \approx 1.00004.$$

Observe que $r \approx 1.1496\times10^{11}\ m$ transforma em círculo a elipse de semi-eixo maior ($152 \times 10^3\, km$) e semi-eixo menor ($147 \times 10^3\, km$). Não assumindo essa aproximação, quanto seria T para a órbita elíptica?

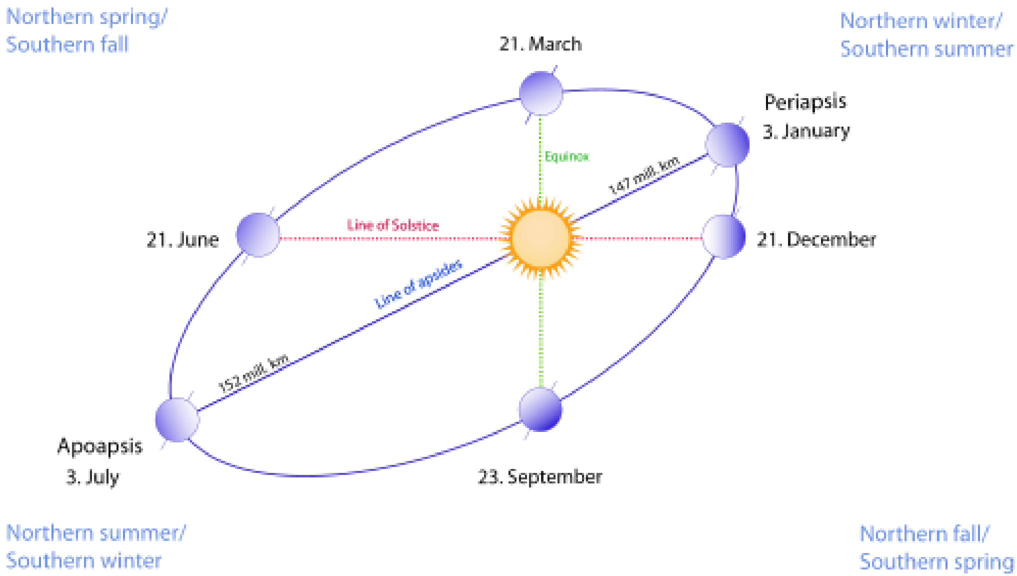


Figura: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Seasons1.svg

Convergindo pi em Python

Existem muitas séries infinitas que convergem no número π, por exemplo a fórmula de Leibniz:

$$\frac{\pi}{4} = \frac{1}{1} - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \ldots$$

Esta série é gerada através do seguinte código em Python:

```
n = 1/1
sig = -1
for i in range(3, 999, 2):
     n = n + (sig * 1/i)
     sig = sig * -1
pi = n*4
assert round(pi, 2) == 3.14
```

Volume da esfera n-dimensional

O volume V da esfera n-dimensional é determinada pela seguinte equação:

$$V_n(r) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\frac{n}{2}!} r^n,$$

Por exemplo, para $n = 2$:

$$V_2(r) = \frac{\pi^{\frac{2}{2}}}{\frac{2}{2}!} r^2 = \pi r^2,$$

Que é a própria área do círculo.