

Editorial	2
Noticiário SPQ	4
Actualidades Científicas	15
Química On-line	19
Livros & Multimédia	21

### Olhares Quirais

Uma lição de António Gedeão: demonstração e parábola no poema "Lição sobre a água" 23

*Christopher Damien Aurette*

### Destaque

O XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química 29

*João Sérgio Seixas de Melo*

Apontamentos da história do Laboratório Químico da Universidade de Coimbra.

A evolução da espectroscopia 33

*M. Ermelinda S. Eusébio, M. Luísa P. Leitão, J. Simões Redinha*

### Artigos

Tensão superficial – sua natureza e efeitos 43

*João Paulo Medeiros Ferreira*

Cinquentenário da Simulação Computacional em Mecânica Estatística 49

*Fernando M. S. Silva Fernandes*

A degradação das rochas do património cultural construído: o caso das rochas carbonatadas 61

*Amélia Dionísio, Luís Aires-Barros, Maria J. Basto*

### Opinião

Consequências da Revisão Curricular do Ensino Secundário no Ensino da Engenharia 69

*Henrique Santos, José Cavalheiro*

### Química e Ensino

Física e Química – A mesma linguagem? 71

*Adriano Sampaio e Sousa, Paulo Simeão Carvalho*

O Big Crunch do Ensino da Química 75

*Carlos Corrêa*

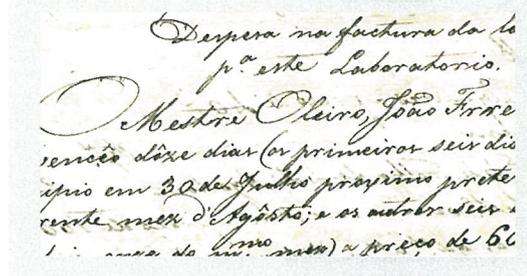
Actividades na sala de aula 72a

Tomar Nota 77

Agenda 79

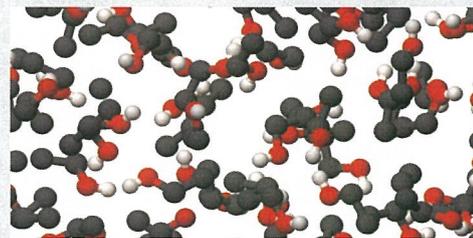
### Destaque 33

Exposição integrada no programa do XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, que teve lugar em Coimbra de 15 a 17 de Abril de 2004.



### Artigos 49

O desenvolvimento da simulação computacional com a introdução do método da dinâmica molecular. Aplicações fundamentais e a situação do domínio em Portugal.



### Artigos 61

As rochas são consideradas pela população em geral, como elementos duros, inertes e duradouros. Todavia as suas características podem vir a modificar-se como resultado da adaptação a um ambiente diferente daquele em que foram geradas.



Boletim da  
SOCIIDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



**Propriedade de:**

Sociedade Portuguesa de Química  
ISSN 0870 – 1180  
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72  
Depósito Legal n.º 51 420/91  
Publicação Trimestral  
N.º 93, Abril – Junho 2004

**Redacção e Administração**

Avenida da República, 37 – 4.º  
1050-187 LISBOA  
Tel.: 217 934 637  
Fax: 217 952 349  
E-mail: boletim@dq.fct.unl.pt  
www.spq.pt

**Editor**

Joaquim Faria

**Editores-Adjuntos**

Carlos Folhadela  
Helder Gomes  
Jorge Morgado  
Marcela Segundo

**Comissão Editorial**

Hugh Burrows (FCT-UC)  
Maria José Calhorda (FC-UL)  
J. Ferreira Gomes (FC-UP)  
Ana Lobo (FCT-UNL)  
Irene Montenegro (UM)  
João Rocha (UA)  
M. N. Berberan e Santos (IST-UTL)  
A. Nunes dos Santos (FCT-UNL)

**Colaboradores**

António Lopes  
Christophe Siquet  
Rui Teives Henriques

**Publicidade**

Helder Gomes  
Tel.: 273 303 112  
Fax: 273 313 051  
htgomes@ipb.pt

**Grafismo**

sentido: designers / Nuno Gonçalves

**Execução Gráfica**

FACSIMILE, Offset e Publicidade, Lda  
Rua Vitor Bastos, 10-A  
1070 – 285 LISBOA  
Tel. 213 829 792  
Fax 213 829 794  
facsimile@netcabo.pt

**Tiragem**

2750 exemplares

**Preço avulso**

€12,50  
Assinatura anual – quatro números  
€45

(Continente, Açores e Madeira)

Distribuição Gratuita aos sócios da SPQ

As colaborações assinadas são da exclusiva responsabilidade dos seus autores, não vinculando de forma alguma a SPQ, nem a Direcção de "Química".

São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas.

A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração podem ser encontradas nas páginas interiores.

**Publicação subsidiada pela**

**FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia**  
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E DA TECNOLOGIA

Apoio do Programa Operacional Ciência,  
Tecnologia, Inovação do Quadro Comunitário de Apoio III



O Química tem uma nova equipa editorial e com ela inicia-se mais um ciclo da vida do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química. Desde o seu lançamento, o boletim tem sido o espaço comum de discussão, troca de ideias e de informação dos sócios da SPQ. Por detrás da natureza, mais ou menos técnica, científica ou educacional de cada artigo, ou secção, está sempre alguém cuja interacção com o leitor (quase uma cumplicidade) se pode encontrar algures no domínio da Química. Esta publicação foi feita pelos sócios e para os sócios da SPQ. As suas páginas devem ser um relato vivo das inúmeras actividades levadas a cabo por todos aqueles que voluntariamente e das mais diversas maneiras contribuem para a missão da SPQ. E com o mesmo espírito voluntário que essas acções são levadas a cabo elas devem ser transmitidas ao Química para se darem a conhecer aos demais sócios. O corpo editorial agora constituído procurou através dos seus membros reunir sensibilidades de vários quadrantes, não exclusivamente ligadas ao meio universitário. Mas, a natureza voluntária da sua participação implica que os recursos editoriais são escassos e estão limitados sobretudo à equipa editorial e aos eventuais colaboradores. Por isso, TODOS os sócios cada um por si, ou em grupo, têm de ser os principais contri-

buintes para os conteúdos das NOSSAS páginas.

O nosso papel é sobretudo manter abertos os canais de comunicação, e dar forma ao conteúdo, facilitando a sua publicação. Vamos tentar estar alerta e atentos aos episódios mais importantes, às movimentações mais interessantes, aos novos problemas e a todas as questões que nos motivam, mas contamos mesmo assim com a vossa valiosa contribuição. Sobretudo nos dias de hoje, estando todos à distância de um simples *e-mail* é bem mais fácil fazer ouvir a nossa voz. Considerem para este efeito aberta a secção "Cartas ao Editor" onde através das vossas cartas esperamos que nos façam chegar temas da actualidade com interesse para o Química.

Neste número a equipa está ainda a ambientar-se e por isso foi tentado um exercício de manutenção acompanhado de ligeiras alterações. Aos leitores de as descobrirem e se acharem por bem, dizerem-nos o que pensam. Este número corresponde também à entrada em funções dos novos corpos directivos da SPQ para o triénio 2004 -2006. As mensagens de acolhimento do novo Presidente e Secretário Geral, podem ser lidas no interior. No seguimento é tam-

bém indicada a constituição nos novos corpos directivos.

Os destaques foram para a grande reunião que é o Encontro Nacional, que desta vez decorreu em Coimbra, organizado pelo colega Doutor Sérgio Seixas de Melo, do Departamento de Química da UC. Paralelamente ao Encontro decorreu uma interessante exposição que pode agora ser visitada, por via do correspondente artigo no interior deste número. Noutra perspectiva, um dos artigos de fundo chama a atenção para os cinquenta anos da introdução definitiva dos métodos de Monte Carlo (1953) e da dinâmica molecular (1957) na simulação computacional. Outros artigos e algumas das habituais secções completam o presente número.

Não podemos deixar de reconhecer que o legado do anterior corpo editorial é extremamente valioso e a responsabilidade de o manter enorme. A actual equipa agradece reconhecidamente na pessoa do anterior editor o Prof. Fernando Pina os simpáticos votos de sucesso, mas agradecemos sobretudo o empenho e a disponibilidade em promover uma transição eficaz e facilitada. Tentaremos manter, e se possível, valorizar tamanha herança.

Joaquim Luís Faria  
boletim@fe.up.pt  
www.spq.pt

Nota: Cartas ao editor discutindo material publicado em números recentes do Química, ou de interesse genérico em química nas suas várias vertentes, podem ser submetidas por correio electrónico ou convencional (ao editor, Departamento de Engenharia Química – FEUP, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 PORTO). A recepção das cartas não é acusada, nem os autores consultados para a sua publicação, podendo ser editadas para publicação em parte, ou no todo, de acordo com as disponibilidades de espaço.

## Boletim da SPQ – Orientação Editorial

Química, o Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, versa todos os assuntos relacionados com a Química, e em particular todos aqueles que dizem respeito à Química em Portugal.

Química publica entrevistas, reportagens, artigos solicitados e propostos,

noticiário, resenhas de livros e outras publicações e correspondência dos leitores.

É dada preferência a artigos de carácter relativamente geral e escritos de modo a despertar interesse a um vasto leque de leitores.

---

## Normas de Colaboração e Instruções para os Autores

1. Os artigos devem ser enviados por correio electrónico, para o endereço do Química, boletim@fe.up.pt. Em alternativa, podem ser enviados dois exemplares impressos dirigidos ao cuidado de Joaquim Luís B. M. Faria, Editor do Química, Departamento de Engenharia Química, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 PORTO.

2. O corpo editorial acusará a recepção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores. Com base nas apreciações obtidas, será decidida a aceitação, recusa das colaborações propostas, ou eventualmente a revisão dos textos pelos autores antes de tomar uma decisão definitiva.

3. Os artigos devem conter um resumo de 50 a 100 palavras com a descrição do respectivo conteúdo. Salvo casos excepcionais, os textos não devem exceder cerca de 36 000 caracteres (5 a 6 páginas da revista, incluindo as figuras). As figuras deverão ter a qualidade indispensável a uma boa reprodução gráfica.

4. Os artigos devem seguir, tanto quanto possível, as recomendações da

IUPAC quanto à nomenclatura e unidades.

5. Na Bibliografia, a indicação abreviada de artigos deve obedecer à convenção autores – volume – ano – página, por exemplo, E. Martinho, J. C. Oliveira, Química (Boletim da Sociedade Portuguesa de Química) 83 (2001) 55. A indicação de livros deverá seguir a convenção autor – título – editor – editora – ano, por exemplo, T. J. Meyer, H. Taube, in Comprehensive Inorganic Chemistry, Vol. 1, G. Wilkinson, R. D. Gillard, J. A. McCleverty (eds.), Pergamon Press, Oxford, 1987, p.331.

6. Em casos especiais, sujeitos à concordância da Direcção da Química, as contribuições poderão ser publicadas em inglês, ou noutra língua estrangeira, devendo então conter um resumo suplementar em português.

7. No caso dos autores desejarem corrigir as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente quando da submissão do texto.

8. A inobservância de qualquer das normas de colaboração poderá levar à devolução do texto recebido.



### Caros sócios da Sociedade Portuguesa de Química,

Foi com grande satisfação que recebi o mandato para servir a SPQ no próximo triénio de 2004 - 2006. A todos os sócios dirijo a minha primeira saudação como Presidente da nossa Sociedade.

A SPQ é uma grande sociedade científica que congrega químicos exercendo as suas actividades no ensino, na investigação científica e desenvolvimento tecnológico, na indústria e no comércio e serviços. Todos nós esperamos da Direcção, agora eleita, empenho, determinação e dinamismo para encarar os novos desafios que se avizinham. Será um período difícil que encaramos com tranquilidade,

porque sabemos poder contar com a vossa ajuda para fortalecer a SPQ.

Assim sendo, será dada continuidade à nossa representação na IUPAC e na FECS. Continuaremos a divulgar as revistas Europeias, Chemistry – A European Journal, EurJOC, EurJIC, ChemPhysChem e ChemBioChem, que fazem parte de um consórcio editorial que integra a SPQ. Quero apelar aos investigadores Portugueses para que considerem a publicação dos seus trabalhos nestas revistas, contribuindo para engrandecer a Química Europeia. Daremos continuidade à realização do Encontro Nacional e dos Encontros Temáticos, para que em conjunto partilhemos dificuldades e sucessos na ciência, no ensino e na actividade industrial. Empenhar-nos-emos ainda na discussão da reforma do ensino da Química e da Engenharia Química no contexto do Tratado de Bolonha.

Não esqueceremos o Ensino Secundário e acompanharemos com a devida atenção e preocupação as reformas em curso, tentando intervir no sentido de influenciar escolhas que conduzam à melhoria do ensino da química e das ciên-

cias em geral. Empenhar-nos-emos na realização das Olimpíadas de Química, com vista à nossa participação na Olimpíadas Ibero-Americanas e Internacionais. Dinimizaremos o intercâmbio entre os docentes do ensino superior e do básico e secundário. Aumentaremos a oferta e a divulgação da carteira de conferências para os agrupamentos de escolas e patrocinaremos a sua realização.

Iniciaremos a discussão sobre as saídas profissionais para os licenciados em Química e Engenharia Química. Igualmente importante será a realização do Encontro de Química Industrial, onde discutiremos a aproximação entre a investigação e o desenvolvimento tecnológico e as necessidades e oportunidades no seio das empresas.

É com o empenho de todos os sócios que formam a nossa comunidade que, dando continuidade ao trabalho desenvolvido nos últimos anos, esperamos tornar a SPQ mais interveniente, para que possa contribuir para a melhoria da Química Portuguesa.

José Gaspar Martinho  
Presidente 2004-2006



### Mensagem do Secretário Geral Eleito

A Química é uma Ciência de importância central na sociedade moderna, e uma das maiores responsáveis pela qualidade de vida de milhões de seres humanos. Claro que a Química por si só não resolve as situações de pobreza e de falta de liberdade. No entanto sem a Química nenhuma sociedade civilizada poderia existir.

Apesar de todos os benefícios que a Química traz para a vida do dia a dia, muitos, talvez a maioria dos cidadãos, fazem um juízo negativo da Química. A nossa Sociedade Portuguesa de Química vai ter uma actividade de esclarecimento da opinião pública, procurando mostrar o que é realmente a Química, os benefícios que nos traz, sem ignorar os malefícios se for mal usada.

Neste mandato pretendemos continuar as acções que têm vindo a ser desenvolvidas nos últimos anos pelos colegas que têm dirigido a Sociedade Portuguesa de Química.

Procurar-se-á evitar concentrar toda a actividade da SPQ em Lisboa, mantendo a descentralização e incentivando-a se necessário. Especial atenção será dada aos ensinos básico e secundário, porque é nessas frentes que se joga o futuro da Química em Portugal. A SPQ

continuará a investir na organização das Olimpíadas da Química porque tem sido um excelente modo de incrementar o interesse pela Química nas camadas mais jovens.

O boletim da SPQ vai continuar com uma equipa renovada.

Procurar-se-á manter e se possível aumentar a organização de encontros científicos, e manter os contactos e compromissos com outras organizações congéneres internacionais.

É nosso objectivo aumentar o número de sócios, dinamizando pequenos núcleos de activistas da SPQ junto das escolas secundárias e Departamentos de Química das Universidades e dos Institutos Politécnicos.

Fernando Pina  
Secretário Geral 2004-2006

**Corpos directivos 2004-2006****Presidência**

José Manuel Gaspar Martinho (IST-UTL)  
Presidente

José Luís Fontes da Costa Lima (FFUP)  
Vice-Presidente

**Conselho Executivo**

Fernando Jorge da Silva Pina  
(FCT-UNL)  
Secretário-Geral

Paulo Jorge Almeida Ribeiro-Claro  
(DQ-UA)

Secretário-Geral Adjunto

Pedro António de Brito Tavares (FCT-UNL)  
Secretário-Geral Adjunto

Eurico José da Silva Cabrita (REQUIM-  
TE-UNL)  
Tesoureiro

**Mesa da Assembleia Geral**

Sebastião José Formosinho Sanches Si-  
mões (DQ-UC)  
Presidente

José João Galhardas de Moura (FCT-UNL)  
1.º Secretário

José Abrunheiro da Silva Cavaleiro  
(DQ-UA)  
2.º Secretário

**Conselho Fiscal**

Fernando Manuel Sebastião Silva Fer-  
nandes (DQB-FCUL)  
Presidente

Manuel Eduardo Ribeiro Minas da Pie-  
dade (DQB-FCUL)  
Secretário

José Manuel Florêncio Nogueira  
(DQB-FCUL)  
Relator

**Balanço do mandato 2001-2003****Índice****1. O que nos propusemos fazer****2. Actividades regulares da SPQ  
prosseguidas**

2.1 Edição do boletim Química

2.2 Organização dos Encontros Secto-  
riais e do Encontro Nacional

2.3 Encontros Internacionais de Quími-  
ca realizados em Portugal

2.4 Organização das Olimpíadas Nacio-  
nais de Química

2.5 Participação nas Olimpíadas Ibero-  
Americanas de Química

2.6 Colaboração com o Ministério da  
Educação (Exames Nacionais, etc)

2.7 Participação em organizações inter-  
nacionais (FECS, IUPAC)

2.8 Gestão das instalações da sede (co-  
muns a quatro sociedades)

**3. Conclusão de iniciativas  
começadas pela anterior Direcção**

3.1 Celebração de protocolo de edições  
com a Lidel

3.2 Publicação do Guia IUPAC para a  
Nomenclatura da Química Orgânica.

3.3 Publicação do Livro Branco sobre o  
Ensino da Física e da Química (ed.  
SPQ/SPF)

**4. O que foi feito de novo**

4.1 Melhorias na sede (mobiliário, inter-  
net, software, biblioteca)

4.2 Regularização da situação laboral  
da funcionária

4.3 Concepção e implementação do  
cartão de sócio

4.4 Nova base de dados dos sócios

4.5 Recuperação de sócios em situação  
irregular

4.6 Pagamento das quotas por transfe-  
rência bancária

4.7 Aperfeiçoamento do sítio www.spq.pt

4.8 Comunicação com os sócios por  
correio electrónico

4.9 Afiliação individual na IUPAC atra-  
vés da SPQ

4.10 Revisão dos Estatutos

4.11 Regularização da situação eleitoral  
de algumas Delegações

4.12 Comemoração dos 90 anos da SPQ

4.13 Criação do Grupo de Fotoquímica

4.14 Criação do Grupo de Colóides, Po-  
límeros e Interfaces

4.15 Aperfeiçoamento da organização  
financeira dos Encontros

4.16 Participação em duas novas revis-  
tas europeias (ChemPhysChem, Chem-  
BioChem)

4.17 Criação do Prémio e Medalha Vi-  
cente de Seabra

4.18 Edição e reedição de publicações  
não periódicas

4.19 Edição da RQPA em CD

4.20 Publicação das propostas de reso-  
lução dos Exames do 12.º ano

4.21 Organização de debates e tomada  
de posição pública sobre a reforma do  
Ensino Secundário, com audiência na AR

4.22 Participação na Olimpíada Interna-  
cional de Química

4.23 Organização das Olimpíadas do 9.º  
ano

4.24 Criação de endereço electrónico  
para dúvidas

4.25 Lançamento de carteira de confe-  
rências para as Escolas

4.26 Apoio a eventos organizados por es-  
tudantes do ensino superior, entre outros

**5. O que foi iniciado, mas não  
concluído durante o mandato**

5.1 1.º Encontro da Divisão de Química  
Industrial

5.2 Angariação de novos sócios colectivos

5.3 Tradução das Nomenclaturas IUPAC  
de QA, QI e QF (livros laranja, vermelho  
e verde)

5.4 Projecto SPF/SPQ sobre ensino se-  
cundário/superior

**6. O que acabou por não se fazer**

6.1 Inquérito aos sócios

6.2 Levantamento da situação da Quí-  
mica e dos químicos em Portugal

6.3 Tradução de livros de divulgação e  
produção de estojo de experiências de  
química

6.4 Criação de Divisões nas áreas de Q.  
Biológica e Q. Medicinal

**7. Conclusões**

Quadro 1 – Encontros em 2001

data	nome	local	Pres. Comissão Organizadora	obs
6-7 Abril	Q. Inorgânica	Monte Real	Baltazar de Castro	5.º
8-11 Maio	Q. Alimentos	Porto (U. Católica)	Xavier Malcata, Alcina Morais	5.º
11-12 Maio	Fotoquímica	Monte de Caparica	Fernando Pina	6.º
18-19 Maio	Catálise	Leiria	José Luís Figueiredo	5.º
8 Setembro	Glúcidos	Lisboa (FCUL)	Amélia Rauter	4.º
12-14 Setembro	Q. Física	Faro	João Brandão	5.º
26-28 Setembro	Q. Orgânica	Coimbra	Rocha Gonsalves, Teresa Melo	4.º
29-30 Outubro	Ensino	Aveiro	Isabel Martins	2.º
8-9 Novembro	Q. Analítica	Lisboa (ISEL)	Filomena Camões	2.º
10-12 Dezembro	Cromatografia	Lisboa (T. Tombo)	José M. Nogueira	2.º
13-15 Dezembro	Radicais Livres	Porto (F. Farmácia)	Fernanda Borges, João Paulo Telo	5.º

Quadro 2 – Encontros em 2002

data	nome	local	Pres. Comissão Organizadora	obs
25-27 Março	Enc. Nacional	Aveiro	Ferrer Correia, João Rocha	18.º
25 Nov.	Simp. de QO	Braga	T. Pinho e Melo	—

Quadro 3 – Encontros em 2003

data	nome	local	Pres. Comissão Organizadora	obs
30-31 Maio	Catálise e Materiais Porosos	Évora (UE)	Peter Carrott	6.º
22-25 Junho	Química de Alimentos	Lisboa (IPIMAR)	Narcisa Bandarra	6.º
1-4 Julho	Química Orgânica	Aveiro (UA)	Artur Silva	5.º
31 Ag.-3 Set.	Química-Física	Lisboa (FCUL)	Fernando Fernandes	6.º
7-10 Setembro	Glúcidos (Glupor 5)	Covilhã (UBI)	M. Isabel Ismael	5.º
18-19 Novembro	Química Analítica	Porto	J. Costa Lima	3.º
20-21 Novembro	Ensino e Divulgação da Química	Esposende	João Paiva, Duarte Costa Pereira	3.º
15-17 Dezembro	Cromatografia	Lisboa (T. Tombo)	J. M. F. Nogueira	3.º

Quadro 4 – Encontros Internacionais

data	nome	local	Pres. Comissão Organizadora	obs
2-7 Set. 2001	Eurocarb XI	Lisboa	Amélia Rauter	—
4-8 Set. 2001	VI ECRICE	Aveiro	A. Cachapuz	2.º
10-12 Out. 2001	Ass. Geral FECS	Porto	J Ferreira Gomes	—
21-23 Nov. 2001	Luso-Galego	La Coruña (Espanha)	Col. Ofic. Quim. Galicia	15.º
11-14 Jun. 2002	Pigments in Food	Lisboa	J. Empis	—
16-21 Set. 2002	II Congresso Ibérico de Espectroscopia	Coimbra	M. Paula Marques	—
11-14 Jun. 2003	FIGIPS7	Lisboa	Rita Delgado	—
10-12 Jul. 2003	In Vino Analytica Scientia III	Aveiro	Ivonne Delgadillo	—
15-20 Set. 2003	I Encontro Ibérico de Fotoquímica	S. de Compostela (Espanha)	Flor R. Prieto	—
23-26 Set. 2003	2.º Encontro Luso-Brasileiro de RMN	Sintra	A. Macedo	—
6 Jan. 2003	Jorge Calado 2003	Lisboa	Edmundo Azevedo	—

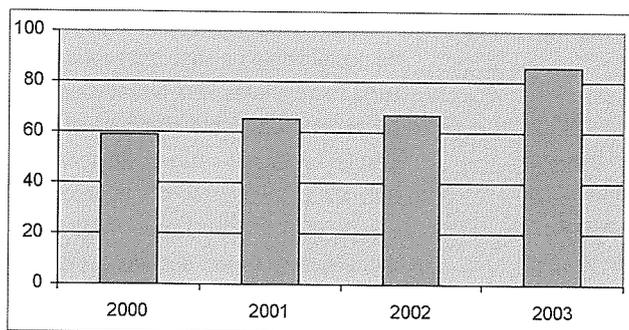


figura 1 Número de escolas participantes em cada edição das olimpíadas de Química

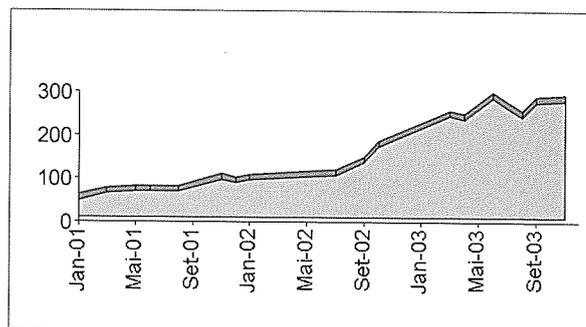


figura 2 Número médio visitantes diários do sítio da SPQ em cada mês

## 1. O que nos propusemos fazer

Transcreve-se o Programa de Acção 2001-2003

A Sociedade Portuguesa de Química é desde há bastantes anos uma das mais dinâmicas e participadas sociedades científicas do país. A sua actividade tem-se desenrolado a um excelente nível, o que se por um lado facilita a tarefa de uma nova Direcção, que pode tirar partido dessa boa condição inicial, por outro lado representa uma responsabilidade maior, dado que as perdas podem também ser grandes em caso de gestão incorrecta.

Conscientes destes factos, propomo-nos manter, e se possível melhorar, a actividade da SPQ nas seguintes áreas:

- i) Organização de encontros regulares (incluindo o Encontro Nacional, e os encontros de Divisões e Grupos da SPQ, e ainda do Encontro Luso-Galego), e respectivas estruturas de apoio, e dinamização de outras actividades no âmbito das Divisões e Grupos.
- ii) Publicações periódicas (Boletim da SPQ, Revistas Europeias de Química em que a SPQ tem participação).
- iii) Publicações não periódicas (livros destinados ao ensino universitário, vídeos e CDs).
- iv) Presença na Internet (dinamização da página da SPQ).
- v) Olimpíadas de Química (nacionais e internacionais).

vi) Representação e participação activa em organismos internacionais especializados (FECS, IUPAC).

Propomo-nos ainda dar uma especial atenção aos seguintes assuntos:

- a) Sede: a situação actual é provisória. É altura de ponderar e prever perspectivas futuras, eventualmente em conjunto com as restantes Sociedades Científicas com quem o espaço da Sede é partilhado.
- b) Sócios. Realização de inquérito aos sócios, para avaliar o seu grau de satisfação e para colher sugestões de futuras acções. Emissão de novo cartão e criação de benefícios adicionais.
- c) Angariação de novos sócios individuais e colectivos, com realização de campanha junto de escolas secundárias e universidades, e ainda junto de empresas.
- d) Análise da situação da Química e dos químicos em Portugal. Estudo da distribuição por sectores de actividade, da situação da indústria química e afins, das perspectivas de emprego, etc.
- e) Divulgação da Química. Publicação de obras de divulgação, quase inexistentes em português, nomeadamente traduções, em conjunto com editoras. Produção e venda de estoques (kits) de experiências contendo modelos moleculares e outra informação, em princípio em conjunto com empresas.

f) Realização de acções de formação e de apoio ao ensino secundário, incluindo conferências e demonstrações.

g) Estudo da possibilidade de criação de novas divisões e grupos, nomeadamente nas áreas da química biológica e da química medicinal.

h) Equilíbrio financeiro da SPQ. Procuraremos obter um máximo de receitas e subsídios, contendo ao mesmo tempo as despesas, por forma a ter-se uma realização plena da missão da SPQ sem enfraquecimento da sua base financeira, e conseqüente autonomia.

## 2. Actividades regulares da SPQ prosseguidas

### 2.1 Edição do boletim Química

O boletim da SPQ (4 números por ano), dirigido pelo Prof. Fernando Pina (FCT-UNL), saiu sempre com grande regularidade, sendo de assinalar a qualidade dos conteúdos publicados.

### 2.2 Encontros Sectoriais e Encontro Nacional (quadro 1, 2 e 3)

Realizaram-se 21 Encontros da SPQ, incluindo 19 encontros sectoriais e um Encontro Nacional.

### 2.3 Encontros Internacionais de Química organizados ou apoiados pela SPQ (ver quadro 4)

### 2.4 Organização das Olimpíadas Nacionais de Química

Depois de um interregno de vários anos, a realização das Olimpíadas de Química foi retomada em 2000. As 3 edições

**Quadro 5 – Participação Portuguesa nas Olimpíadas Ibero-Americanas**

Ano	País organizador	Observações
1999	Espanha	Envio de observador
2000	Venezuela	1ª participação com equipa
2001	Chile	Cancelado pela organização
2002	Argentina	1 Medalha de Bronze
2003	México	2 Medalhas de Bronze

realizadas durante o mandato da actual Direcção (2001, 2002 e 2003) consolidaram as Olimpíadas de Química como uma actividade regular da Sociedade destinada aos professores e aos alunos do Ensino Secundário.

Do ponto de vista da organização, foi actualizado o regulamento da prova, constituída uma equipa alargada de colaboradores, sistematizada a divulgação às Escolas (com a criação de um cartaz e folheto) e, recentemente, alargada a participação aos alunos do 10.º ano de escolaridade. A evolução do número de escolas participantes em cada ano – que reflecte a adesão de professores e alunos a esta actividade –, pode ser observada na figura 1.

#### Número de escolas participantes em cada edição

As Olimpíadas de Química foram financiadas pelo Ministério da Educação e pelo programa Ciência Viva (Ministério da Ciência e Tecnologia / Ministério da Ciência e Ensino Superior) e contaram com o apoio da Universidade de Aveiro (Reitoria e Departamento de Química), Universidade Técnica de Lisboa (Instituto Superior Técnico) e Universidade do Porto (Reitoria e Departamento de Química).

#### 2.5 Participação nas Olimpíadas Ibero-Americanas de Química

A SPQ continuou a assegurar a representação portuguesa nas Olimpíadas Ibero-Americanas de Química, iniciada pela Direcção anterior. Com o objectivo de permitir uma melhor representação nacional, e a exemplo do que sucede nos restantes países concorrentes, foi organizado um programa de preparação específica para os alunos participantes. Este programa, possível pela disponibili-

dade de vários sócios (da D. R. Aveiro), teve 3 dias de aulas tutoriais em 2002 e 7 dias em 2003.

O quadro 5 resume os resultados da participação portuguesa:

#### 2.6 Colaboração com o Ministério da Educação (Gave)

A SPQ, na pessoa do Prof. Moura Ramos (IST) manteve uma estreita colaboração com o Gave, nomeadamente elaborando pareceres sobre os exames nacionais do 12.º ano (Química).

#### 2.7 Participação em organizações internacionais (FECS, IUPAC)

A SPQ teve uma participação activa na FECS e na IUPAC. A representação na FECS foi coordenada pelo Presidente da SPQ, Prof. Ferreira Gomes. Os Profs. José Empis (IST), Filomena Camões (FCUL) e Fernando Fernandes (FCUL) tiveram uma actividade independente (Divisão de Química Alimentar, Divisão de Química Analítica, e Working Party de Química Computacional, respectivamente). Foi organizada uma assembleia geral da FECS em Portugal em 2001.

A representação da SPQ nas Assembleias Gerais da IUPAC foi assegurada pelo Prof. Bernardo Herold (IST). Recentemente (2004) a Afiliação Individual de químicos portugueses na IUPAC passou a fazer-se exclusivamente através da SPQ.

#### 2.8 Gestão das instalações da sede (comuns a quatro sociedades)

A sede é a face visível dos sócios que procuram directamente a sociedade e como tal tem de ser um local aprazível e adequado a receber todos os que regularmente nos procuram no nº 37 da Av. da República. Por isso, foram melhora-

das as instalações e as infra-estruturas de acolhimento na sede, nomeadamente na secretaria da SPQ, biblioteca e sala de espera. Enquanto responsável pela Comissão Gestora das Instalações, a SPQ fez a manutenção dos espaços, de acordo com as várias necessidades de intervenção ao nível do isolamento das paredes e reparação de pequenas avarias. Novo mobiliário, mais confortável e funcional foi adquirido permitindo agora que qualquer consulta ou assunto possa ser comodamente tratado. Procedeu-se também à aquisição de pequenos electrodomésticos de apoio de modo a aumentar o conforto das instalações para os eventuais visitantes. Foram mantidos os contratos de limpeza, segurança e manutenção, tendo-se regularizado algumas situações e revisto os planos de seguros dos prestadores de serviços envolvidos.

No ano de 2004 foi apresentada uma proposta de ajuste dos espaços físicos do imóvel da Av. da República que espelhasse as reais contribuições em vigor pelos diferentes ocupantes. A proposta foi aceite por unanimidade e a distribuição resultante devidamente assinada e datada. Na actual distribuição a Sociedade Portuguesa de Química detém 5 salas numa área total de 70 m<sup>2</sup>, além de partilhar uma área comum de armazém e serviços com 120 m<sup>2</sup>.

### 3. Conclusão de iniciativas começadas pela anterior Direcção

#### 3.1 Celebração de protocolo de edições com a Lidel

Foi assinado um protocolo de edições com a Editora Lidel para edição de livros de interesse mútuo.

#### 3.2 Publicação do Guia IUPAC para a Nomenclatura de QO

Já no âmbito do protocolo mencionado em 3.1, foi finalizado e editado o Guia IUPAC para a Nomenclatura de Química Orgânica, cuja tradução foi coordenada pelos Professores Bernardo Herold (IST) e Amélia Rauter (FCUL). Esta obra tem tido uma procura assinalável.

3.3 Publicação do Livro Branco sobre o Ensino da Física e da Química (ed. SPQ/SPF)

Publicou-se o Livro Branco sobre o Ensino da Física e da Química, coordenado pela Prof<sup>a</sup>. Anabela Martins (SPF) e (na sua fase inicial) pela falecida Prof. Mariana Pereira (SPQ). O livro teve uma aceitação significativa, tendo sido necessário proceder a segunda tiragem.

#### 4. O que foi feito de novo

##### 4.1 Melhorias na sede (mobiliário, *internet*, *software*, biblioteca)

O espaço de secretaria da SPQ foi mobilado com um conjunto de expositores que permitem a quem procura os serviços da sede, poder apreciar visualmente os artigos disponíveis para venda (medalhas, publicações e diverso material de divulgação).

As condições de trabalho da funcionária também foram substancialmente melhoradas no que respeita às infra-estruturas de apoio (acesso à internet, actualização de software para apoio ao escritório electrónico e central telefónica). O local de trabalho foi rearranjado e substancialmente ampliado, melhorando as comodidades da funcionária, tendo sido adquiridos um conjunto de pequenos electrodomésticos que também contribuíram para esta melhoria.

##### 4.2 Regularização da situação laboral da funcionária

A situação laboral da funcionária foi regularizada de acordo com as portarias de trabalho em vigor. A elaboração da nova proposta de ajuste teve por base o estabelecido pela portaria de regulamentação do trabalho (PRT) para trabalhadores administrativos publicada no Boletim do Trabalho e Emprego (BTE). De acordo com a referida portaria as funções exercidas correspondiam à profissão de Secretário para efeitos de tabela salarial. A remuneração em vigor publicada no BTE fazia com que na altura o vencimento base da funcionária estivesse cerca de 45% acima do valor tabelado.

Introduziu-se o Regime de Diuturnidades, calculado com base na portaria referida, e tendo em consideração que na altura (2001) a funcionária contava 13 anos de serviço. Embora a portaria estabelecesse que tratando-se da primeira aplicação do regime de diuturnidades, o trabalhador apenas teria direito a uma primeira diuturnidade, achou-se por bem que se repusesse o valor correspondente ao número de anos de serviço efectivo. Em Janeiro de 2003 foi atingido o limite máximo permitido de 5 diuturnidades para a actual categoria da funcionária (Técnica administrativa, nível V). Foram sucessivamente actualizados os subsídios de alimentação e deslocação, horas extraordinárias, ajudas de custo para cobrir despesas de estadia e viagem, prémios e gratificações.

Todo o processo decorreu de maneira harmoniosa, tendo para isso contribuído o facto da funcionária estar consciente da sua posição dentro da Sociedade e ter agido de maneira francamente razoável.

##### 4.3 Concepção e implementação do cartão de sócio

Foi criado e distribuído aos sócios um novo cartão de identificação, comparável ao de outras sociedades de Química.

##### 4.4 Nova base de dados dos sócios

A informação sobre os sócios encontrava-se numa base de dados criada há cerca de 10 anos e que carecia de manutenção. Foi por isso construída uma nova base de dados com toda a informação existente, e mais adaptada às necessidades de processamento actuais. A versão actual possui uma nova interface mais intuitiva, funcionalidades simplificadas na quotização e emissão de recibos, listas, e etiquetas; introdução das cobranças por transferência e conciliação com a afiliação individual na IUPAC. Foi melhorado o nível de segurança, estando agora os dados protegidos contra eventuais usos inadvertidos por parte do operador. Lamentavelmente, a informação histórica que não estava em suporte informático relativa à data original de afiliação dos nossos sócios, não pôde ser introduzida, por já não se

encontrar em arquivo há vários anos. A actual numeração resulta da alteração efectuada em 1994, com todas as correcções que contém, e não reflecte a antiguidade dos sócios. As categorias de sócios foram alargadas, de modo a contemplar os sócios que são gerados anualmente nas Olimpíadas de Química, e cuja revisão é agora automática após o primeiro ano. Também a suspensão dos sócios que não actualizam as quotas após dois anos é agora feita automaticamente. Após 5 anos de incumprimento, os dados pessoais são transferidos para um arquivo separado.

##### 4.5 Recuperação de sócios em situação irregular

Foi feito um esforço para recuperar os sócios com quotas em atraso, quer pela conferência das inscrições em Encontros com os registos centrais, quer por várias circulares enviadas aos faltosos. Obtiveram-se bons resultados com esta iniciativa.

##### 4.6 Pagamento das quotas por transferência bancária

Foi introduzido o pagamento de quotas por transferência bancária, num processo iniciado em Fevereiro de 2001, mas infelizmente por razões que nos ultrapassam e têm a ver com o país que todos construímos de uma maneira ou de outra, no caso específico da SPQ, o processo de cobrança automática das quotas levou cerca de 3 anos a implementar! Alguns dos pedidos, inexplicavelmente, não puderam simplesmente ser cobrados, independentemente do banco, ou agência. A SPQ não era a única a viver estes problemas, e só em Setembro de 2003 foi instaurado a nível nacional um procedimento bancário que regularizou a situação de várias instituições nas condições da SPQ. Cerca de 30% dos associados aderiram a este modo de pagamento, o que justifica o esforço realizado.

##### 4.7 Aperfeiçoamento do sítio [www.spq.pt](http://www.spq.pt)

O sítio da SPQ na *internet* é um excelente meio para a divulgação da Sociedade e para o contacto e comunicação com os

sócios. Por este motivo, foi feito um esforço de criação e actualização de seus conteúdos, de forma a torná-lo uma fonte de informação útil e de fácil acesso. Assim, além da actualização de dados acerca da própria SPQ (os estatutos, a constituição dos órgãos dirigentes, a história da SPQ) e do desenvolvimento de algumas páginas já existentes (os Encontros científicos, o boletim "Química" em versão *on-line*, as revistas europeias da SPQ), foram acrescentadas as páginas referentes às Delegações Regionais, às Olimpíadas de Química, aos prémios Ferreira da Silva e Vicente Seabra e à "Carteira de Conferências". Adicionalmente, foi criada uma secção de "Destques" na página de entrada, de actualização rápida, onde surgem notícias, chamadas de atenção a prazos, e informações, como, por exemplo, a resolução dos exames nacionais do 12.º ano.

Este esforço foi compensado com um aumento significativo do número de visitantes: de uma média de 40 visitantes/dia em Janeiro de 2001, já ultrapassou os 300 visitantes/dia em alguns períodos de 2003, como se mostra na figura 2, com o número médio de visitantes/dia em cada mês.

#### 4.8 Comunicação com os sócios por correio electrónico

O endereço [spq@spq.pt](mailto:spq@spq.pt) foi criado e utilizado activamente para dar resposta (nem sempre tão rapidamente quanto desejável) aos inúmeros pedidos que foram chegando. Foram centenas de solicitações dos mais variados tipos: a mais corrente foi sem dúvida o pedido de correcção de dados por via da actualização da morada, ou alteração do tipo de sócio; seguiram-se os pedidos relacionados com incertezas na quotização (qual o ano a pagamento, qual o último ano pago, etc...); pedidos de reposição de material (sobretudo o boletim) extraído; e ainda outros, às vezes de resposta menos imediata. Algumas vezes, quando o volume pontual de mensagens era muito elevado, apenas a mensagem do sistema automático de resposta chegava ao sócio, na certeza porém de que a ausência de uma res-

posta personalizada, não significava que o pedido não tivesse tido a merecida atenção.

#### 4.9 Afiliação individual na IUPAC através da SPQ

A partir de 2004, a afiliação individual na IUPAC para químicos exercendo a sua actividade em Portugal passou a fazer-se exclusivamente através da SPQ. Passou-se de um número muito reduzido (2), para quase uma centena de afiliados, o que constitui já um número apreciável em termos das afiliações individuais na IUPAC.

#### 4.10 Revisão dos Estatutos

Desde há vários anos que se impunha uma revisão dos Estatutos, por várias razões:

- 1) Defeitos de forma da anterior versão, que levantavam nomeadamente graves problemas aquando da transferência de assinaturas da conta bancária da SPQ para cada nova direcção.
- 2) Necessidade de actualização (ainda era referida a extinta Revista Portuguesa de Química, etc).
- 3) Serem omissos em relação a pontos importantes, normalmente contidos em Estatutos de associações congéneres.

Após discussão no seio do Conselho Directivo, entregou-se a elaboração de uma proposta de Estatutos a um escritório de advogados (Assis de Almeida e Associados). A proposta final foi sujeita a apreciação e votação na Assembleia Geral da SPQ realizada em Março de 2004, tendo sido aprovada por unanimidade.

#### 4.11 Regularização da situação eleitoral de algumas Delegações

Procedeu-se a eleições nas delegações da SPQ cujos mandatos tinham já expirado, e regularizou-se a situação da delegação de Coimbra, sem presidente nem vogais há vários anos.

#### 4.12 Comemoração dos 90 anos da SPQ

Foram assinalados os 90 anos da SPQ no boletim Química, nomeadamente com a publicação de uma lista de todos os sócios, o que já não se verificava desde os anos 20. Foi enviado a todos os sócios um CD com a Tabela Periódica dos Elementos, e emitido um novo cartão de sócio.

#### 4.13 Criação do Grupo de Fotoquímica

Foi criado em 2001 o Grupo de Fotoquímica da SPQ, sendo seu primeiro Presidente o Prof. Fernando Pina (FCT-UNL).

#### 4.14 Criação do Grupo de Colóides, Polímeros e Interfaces

Foi criado em 2003 o Grupo de Colóides, Polímeros e Interfaces da SPQ, sendo o seu primeiro Presidente o Prof. Hugh Burrows (FCT-UC).

#### 4.15 Aperfeiçoamento da organização financeira dos Encontros

Foram desenvolvidos pequenos aplicativos de fácil utilização, para a gestão centralizada dos encontros patrocinados pela SPQ. Estes aplicativos permitem que independentemente da localização geográfica de qualquer evento, todas as inscrições e pagamentos podem ser controladas a partir da sede. Cada novo registo num dado evento é imediatamente confrontado com a base de dados dos sócios da SPQ para averiguar a situação de sócio e aplicação dos eventuais benefícios na inscrição, produz uma actualização imediata da base de dados específica do encontro, e permite após boa cobrança a emissão do respectivo recibo.

Estes aplicativos foram testados em 2003 em 2 encontros sectoriais e um simpósio, com resultados visíveis no que respeitou à cobrança e emissão de recibos. Deste modo as comissões organizadoras puderam ser libertadas de uma tarefa administrativa algo pesada, ficando liberas para outras funções. Além disso permite à direcção da SPQ manter um ficheiro actualizado sobre as participações em cada evento, e passar essa informação às organizações seguintes, naqueles eventos tradicionalmente organizados pela divisões e grupos.

Foi também celebrado protocolo com a UNICRE, por forma a termos um número de registo que permite pagamentos por cartão de crédito. Foi experimentado em 3 encontros internacionais e, pode dizer-se que está funcional para outras situações futuras.

4.16 Participação em duas novas revistas europeias (ChemPhysChem, ChemBioChem)

A SPQ tornou-se co-proprietária, em condições favoráveis, de dois novos periódicos europeus de química, ChemPhysChem, a European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry, e de ChemBioChem, a European Journal of Chemical Biology. Estas revistas têm já hoje um factor de impacto elevado.

4.17 Criação do prémio e Medalha Vicente de Seabra

Foi criada a medalha Vicente de Seabra, destinada a premiar químicos portugueses de idade não superior a 40 anos, e trabalhando em Portugal. Foi já atribuída a primeira medalha em 2004, durante o Encontro Nacional de Química, em Coimbra.

4.18 Edição e reedição de publicações não periódicas

O plano de Edições não periódicas da SPQ, coordenado pelo Prof. Miguel Castanho (FCUL), levou a cabo várias edições, oportunamente noticiadas. Foram nomeadamente reeditadas as Demonstrações de Química, e editadas (pela Lidel) as obras Guia IUPAC para a Nomenclatura de Química Orgânica, Cinética Química, Tópicos de Biofísica de Membranas, Estatística para Químicos, e ainda (pela SPQ) editada a Tabela Periódica dos Elementos em CD, e uma tradução do Tratado Elementar de Química de Lavoisier (produção em curso).

4.19 Edição da RQPA em CD

Procedeu-se à digitalização integral da Revista de Chimica Pura e Applicada (1905-1956). O respectivo CD encontra-se pronto e em fase de distribuição aos sócios.

4.20 Publicação das propostas de resolução dos Exames do 12.º ano

Uma equipa de sócios da SPQ assegurou a publicação das propostas de resolução dos Exames de Química do 12.º ano nos próprios dias do exame, com envio para órgãos de comunicação social, editoras, e colocação no sítio da SPQ.

4.21 Organização de debates e tomada de posição pública sobre a reforma do Ensino Secundário, com audiência na AR (2003)

A SPQ, nas pessoas do seu Presidente e do Presidente da Divisão de Ensino, organizou vários debates e tomou posição pública sobre a reforma do ensino secundário. Essa posição, com o apoio de várias centenas de professores do ensino secundário, foi apresentada na Assembleia da República, como noticiado no boletim.

4.22 Participação na Olimpíada Internacional de Química

A participação de estudantes portugueses na Olimpíada Internacional de Química (IChO) foi assumida como uma prioridade desta Direcção. De acordo com o regulamento da IChO, a SPQ enviou observadores científicos a duas edições consecutivas – 2001 (Índia) e 2002 (Holanda) – tornando-se, assim, participante de pleno direito. A primeira participação efectiva de Portugal na IChO, com uma equipa de 4 alunos, ocorreu em 2003 (Grécia), estando já em preparação a participação em 2004 (Alemanha).

4.23 Organização das Olimpíadas do 9.º ano

Foram lançadas em 2004, a título experimental, as Olimpíadas de Química do 9.º ano de escolaridade, realizadas a nível regional pela Delegação de Aveiro.

O sucesso desta edição experimental criou boas expectativas para a sua consolidação a nível nacional.

4.24 Criação de endereço electrónico para dúvidas

Foi criado e divulgado no boletim "Química" e no sítio da *internet*, um endere-

ço de correio electrónico para esclarecimento de questões de química. Este serviço, com alguma procura e evidente utilidade, foi assegurado pela Divisão de Ensino e Divulgação da Química, sob coordenação do Dr. João Paiva (FCUP).

4.25 Lançamento de carteira de conferências para as Escolas

Respondendo a solicitações de vários sócios, a Direcção da SPQ decidiu criar uma "Carteira de Conferências" destinada a públicos variados do ensino secundário (v. lista em [www.spq.pt](http://www.spq.pt)). Este projecto teve a adesão de um conjunto de docentes que permitiram a formação do núcleo inicial da carteira: uma lista de que constam actualmente cerca de 30 temas, com indicação do contacto do conferencista, duração, público-alvo e recursos necessários da conferência. O balanço do primeiro ano de existência desta "Carteira" mostrou a necessidade de se proceder a uma maior divulgação desta iniciativa entre os potenciais interessados.

4.26 Apoio a eventos organizados por estudantes do ensino superior, entre outros

Foram apoiadas várias iniciativas de estudantes do ensino superior ligadas à Química, nomeadamente jornadas de finalistas da UNL, e o Concurso/Exposição "Tabela Periódica: Um Elemento em Cada Casa, Uma Casa para Cada Elemento" organizado pelo Instituto Superior de Engenharia do Instituto Politécnico do Porto.

## 5. O que foi iniciado, mas não concluído durante o mandato

5.1 1.º Encontro da Divisão de Química Industrial

5.2 Angariação de novos sócios colectivos

5.3 Tradução das Nomenclaturas IUPAC de QA, QI e QF (livros laranja, vermelho e verde)

5.4 Projecto SPQ/SPQ sobre ensino secundário/superior

## 6. O que acabou por não se fazer

6.1 Inquérito aos sócios

6.2 Levantamento da situação da Química e dos químicos em Portugal

6.3 Tradução de livros de divulgação e produção de estojos de experiências de química

6.4 Criação de Divisões nas áreas de Q. Biológica e Q. Medicinal

## 7. Balanço final

A comunidade nacional de químicos, professores e estudantes de química,

está viva e activa. A SPQ reflectiu esta realidade numa multiplicidade de actividades. Como se pode constatar, a Direcção actuou em parte apenas como catalisador, tendo o trabalho sido efectivamente realizado por muitas dezenas de sócios, de Norte a Sul do país, nomeadamente na organização dos Encontros e na coordenação e execução de todas as outras actividades descritas. Agradecemos a todos a boa colaboração e os serviços prestados, nem sempre

devidamente apreciados numa sociedade em que a actividade associativa dos cidadãos é reduzida e pouco apoiada. Não podemos também deixar de nos regozijar com a coesão da Direcção cessante. Certos da qualidade e dedicação da nova Direcção, resta-nos desejar-lhe as maiores felicidades.

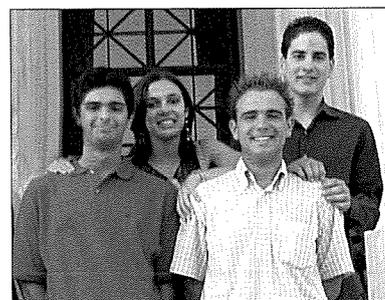
A Direcção cessante

## Portugal nas Olimpíadas Internacionais de Química

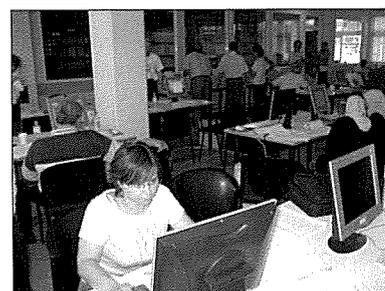
Realizou-se em Atenas, de 5 a 14 de Julho de 2003, a 35.ª Olimpíada Internacional de Química. Depois de dois anos consecutivos como observador (imposição regulamentar), Portugal (tal como o Japão) enviou a sua primeira equipa, constituída por quatro estudantes e dois mentores. Na competição participaram 62 países, num total de 232 estudantes e 176 mentores e observadores. Foi uma interessante experiência para todos os portugueses, estudantes e mentores. Em consequência de uma avaliação "no terreno", a SPQ decidiu reformular a Olimpíada Nacional de Química (o que aconteceu já em 2004), por forma a proporcionar aos estudantes uma preparação mais adequada a uma prova exigente, não tanto pela dificuldade intrínseca das matérias, mas sobretudo pela sua extensão e posicio-

namento curricular. Na quase totalidade, as questões são muito acessíveis mas correspondem em parte a matérias ensinadas nos nossos 1.º e 2.º ano universitários. Os estudantes portugueses tiveram um desempenho muito bom em relação à matéria que conheciam. Apesar de várias sessões de preparação intensiva na Universidade de Aveiro, não foi contudo possível cobrir todos os assuntos, devido à data das Olimpíadas nacionais e aos vários constrangimentos escolares (e.g. exames do 12.º ano). O balanço foi contudo positivo, e a SPQ continuará a assegurar uma participação nacional condigna que, com os aperfeiçoamentos já em curso, levará a um melhor posicionamento dos nossos estudantes na classificação geral.

Mário Nuno Berberan e Santos  
Mentor da equipa portuguesa



**figura 1** 1ª equipa portuguesa participante numa Olimpíada Internacional de Química (XXXV). Da esquerda para a direita: André Ramos (Porto), Ana Vieira (Espinho), Gonçalo Félix (Aveiro) e Carlos Oliveira (Aveiro).



**figura 2** Aspecto da sala de tradução das provas. Em primeiro plano, Diana Pinto (U. Aveiro), mentora da equipa portuguesa.

## Jovens pioneiros na Olimpíada Internacional de Química

Depois de uma selecção em Portugal, quatro jovens participaram na Olimpíada Internacional de Química, representando o país neste evento pela primeira vez.

Após de três eliminatórias: sucessivamente ao nível de escola, regional e nacional, os quatro vencedores das Olim-

píadas Portuguesas de Química, Ana Filipa Vieira de Espinho, André Ramos do Porto, Carlos Oliveira de Aveiro, e Gonçalo Félix também de Aveiro, participaram nas provas Internacionais que se realizaram em Hellas – Grécia, entre 5 e 14 de Julho.

Os rapazes ficaram hospedados, nos primeiros cinco dias, num Sport Camp em Loutraki – cidade perto do mar – en-

quanto as raparigas foram instaladas num hotel, onde podiam desfrutar de maravilhosas praias com uma confortável água quentinha, visitando os seus colegas durante o dia. Neste complexo os participantes tinham à sua disposição, campos de ténis, de voleibol, de basquetebol e de futebol, mesas de ping-pong, uma piscina e ainda uma esplanada para poderem conviver, passando o tempo livre.

Tempo livre que foi interrompido por duas vezes: aquando da prova prática, a 8 de Julho e aquando da prova teórica a 10 de Julho. A prática foi realizada no Complexo de Química de uma das universidades gregas e consistiu numa experiência de química orgânica – a síntese de um composto (Ac-L-pro-L-phe-OCH<sub>3</sub>) e numa simples titulação. A prova teórica realizou-se num pavilhão do Sport Camp onde os 232 participantes passaram cinco penosas horas, com um imenso calor. Para os participantes portugueses a prova teórica foi a mais difícil, especialmente a parte orgânica que, por sinal, valia boa parte do teste.

Depois destes dias passados no Sport Camp os estudantes mudaram-se para o "President Hotel", no centro de Atenas, onde relaxaram e se divertiram.

Durante a estadia na Grécia, houve tempo para várias visitas organizadas às

ruínas de cidades e vilas ancestrais, como Corinto, Delfos, Acrópole – berços da civilização ocidental...

Os mentores também desfrutaram de momentos de descontração como um cruzeiro pelas ilhas gregas, para compensar do trabalho de traduzir e corrigir os testes.

Quanto à hospitalidade "Há que destacar o bom humor, simpatia e disponibilidades de todos os guias que acompanharam os participantes", diz Gonçalo Félix.

Embora nenhum elemento da equipa portuguesa tenha obtido uma medalha ou menção honrosa, todos fizeram uma boa prova para a sua preparação.

Ana Filipa diz que "melhor que qualquer medalha ou prémio material é o reconhecimento que todos os guias demonstraram na despedida, dizendo que a equipa portuguesa tinha sido a melhor

pela sua boa disposição, sentido de humor e adaptabilidade.

Como experiência de vida, dizem os estudantes portugueses, "foi magnífico, uma vez que se conheceram jovens de inúmeros países, cada um com os seus costumes, alguns bem interessantes e diferentes, se trocaram ideias e se conheceram diferentes modos de encarar a vida, se trocaram jogos, enfim, todos juntos tornaram-se uma grande família durante aqueles inesquecíveis 9 dias".

Foi uma boa prestação e uma inesquecível experiência que os quatro jovens e dois mentores portugueses adquiriram neste evento que ficará na mente de todos por ter sido a primeira vez que Portugal participou nele.

Carlos Oliveira

Estudante da equipa portuguesa



figura 1 Entrega das medalhas

## Olimpiadas de Química Júnior

A 1ª edição, realizada a nível regional, foi considerada um sucesso por organizadores e participantes. O objectivo para o próximo ano é conseguir alargar as Olimpíadas de Química Júnior a todo o país.

Na tentativa de dar resposta aos múltiplos pedidos de professores e alunos do ensino básico, a Sociedade Portuguesa de Química, em colaboração com o Departamento de Química da Universidade de Aveiro, realizou este ano a 1ª edição das Olimpíadas de Química Júnior, destinadas aos alunos do 9.º ano de escolaridade.

A prova decorreu no passado dia 24 de Abril nas instalações da Universidade

de Aveiro. Participaram 124 alunos, oriundos de 25 escolas básicas da região. Durante 2 horas, os competidores, organizados em equipas de 3 alunos, participaram num concurso de perguntas e respostas *contra-relógio* e percorreram as salas "verdes" e os laboratórios "amarelos" e "azuis", onde assistiram a demonstrações, observaram montagens e realizaram pequenas experiências, respondendo a um total de 70 questões de Química.

A meio da tarde foram anunciadas as equipas vencedoras. A equipa constituída por Diana Monteiro, Ricardo Ferreira e Miguel Saraiva, do Externato das Escravas do Sagrado Coração de Jesus, conquistou a medalha de ouro, com 90% de respostas certas. A medalha de prata foi conquistada pela equipa consti-

tuída por Ana Catarina, Marta Braga e Vânia Costa, da Escola EB23 de Arrifana, e a medalha de bronze foi arrebatada por Ana Silva, Pedro Silva e David Wessling, da Escola Evaristo Nogueira – Viseu.

Os objectivos definidos para esta 1.ª edição (na verdade, uma edição experimental) eram ambiciosos: organizar uma competição que proporcionasse a um *número elevado* de estudantes do ensino básico um contacto apelativo com a química na sua vertente de ciência *experimental*. Ficavam assim de fora as provas clássicas de "papel-e-lápis", mas também as provas "em computador", substituídas por provas de laboratório, ou, pelo menos, provas "em laboratório".

O convite para participação foi enviado às escolas básicas da região no início do

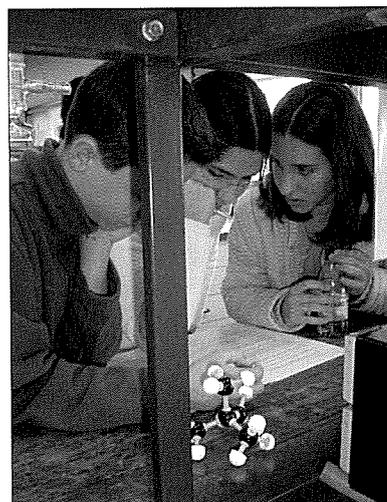
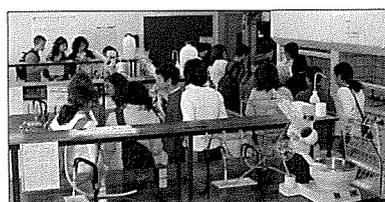
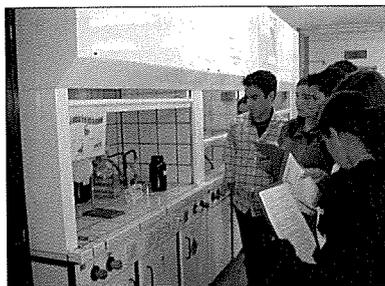


figura 2 Alunos em prova

ano e exibido na página das Olimpíadas na *internet*, deixando claro que, apesar do seu âmbito preferencialmente regional, seriam aceites escolas de todo o país, "até ao limite da capacidade de acolhimento".

A "capacidade de acolhimento" é, de facto, um problema quando se ambiciona um número elevado de participantes numa prova experimental: definido o patamar mínimo de 100 participantes, como é que se organiza uma competição em laboratório de Química para uma centena de alunos do 9.º ano?

A solução surgiu sob a forma de questões diversificadas: demonstrações, quebra-cabeças, problemas de detectives e muitas perguntas de "observar e mexer". Estas últimas merecem uma explicação: são montagens com equipamento de laboratório, reagentes ou produtos do quotidiano, cuja observação ou manipulação permite responder a uma pergunta. Não posso incluir exemplos neste texto, porque há que resguardar as questões para futuras edições das Olimpíadas Júnior, mas alguns exemplos muito simples, da fase de concepção das provas, estão ainda acessíveis na página das Olimpíadas de Química Júnior ([www.spq.pt](http://www.spq.pt)). As diversas questões foram distribuídas por 6 salas e laboratórios, de acordo com o seu carácter mais ou menos experimental, e agrupadas pelas cores verde, amarelo e azul, usadas nas folhas de resposta e que definiam o percurso de cada equi-

pa... com uma boa sincronização, é possível ter várias equipas a iniciar a prova em diferentes salas, a circular pelas 6 salas e a completar a prova, em simultâneo, ao fim de 60 minutos (eu disse "é possível", não disse "é fácil"...).

Ainda assim, foi necessário dividir os participantes em 2 turnos, que realizaram o percurso em momentos diferentes. Para ocupar o tempo de espera de cada um dos turnos, foi concebido um jogo de perguntas e respostas – seguindo o modelo de um popular concurso televisivo – tendo a Química como tema exclusivo. Uma parte deste jogo, designado por "Contra relógio" foi integrada na competição (isto é, as respostas de cada equipa foram contabilizadas para a classificação final). Uma outra parte foi utilizada para um momento de descontração, sob a forma de "O jogo do lápis", assim chamado porque cada resposta certa dava direito a ... um lápis. De salientar que este jogo de perguntas e respostas foi integralmente preparado por professores do ensino básico que se associaram a esta organização – desde a constituição de um lote de perguntas com 3 respostas de opção, até à preparação da apresentação para projecção em "DataShow".

A participação dos professores do ensino básico merece, aliás, ser aqui salientada. Desde o primeiro momento foram vários os que se disponibilizaram para colaborar e que deram o seu contributo de diversas formas. O núcleo mais acti-

vo, que chegou a deslocar-se à Universidade de Aveiro para reuniões preparatórias, foi naturalmente incluído na lista da Comissão Organizadora. Mas fica aqui também o agradecimento a todos os outros pelas suas variadas contribuições, a começar pela disponibilidade para estarem presentes nas Olimpíadas de Química Júnior com as suas equipas.

E se os professores colaboraram, que dizer dos alunos? Não passou despercebido o excelente comportamento e colaboração activa dos alunos participantes. Integraram totalmente o espírito das Olimpíadas, realizaram as provas com empenho, colaboraram com todas as solicitações, facilitaram o trabalho da organização, aplaudiram os vencedores, e ainda deram sugestões para a próxima organização. Se as Olimpíadas de Química Júnior se podem considerar uma iniciativa bem sucedida, uma parte desse sucesso deve ser atribuída aos alunos participantes.

*"Gostava de informar que adorámos participar e aprendemos muitas coisas novas com esta ida a Aveiro."*

Mensagem de Ana Cláudia Duarte do Coito, da Escola Secundária c/ 3.ª CEB de Gouveia

Paulo Ribeiro Claro  
Coordenador das Olimpíadas de Química da SPQ

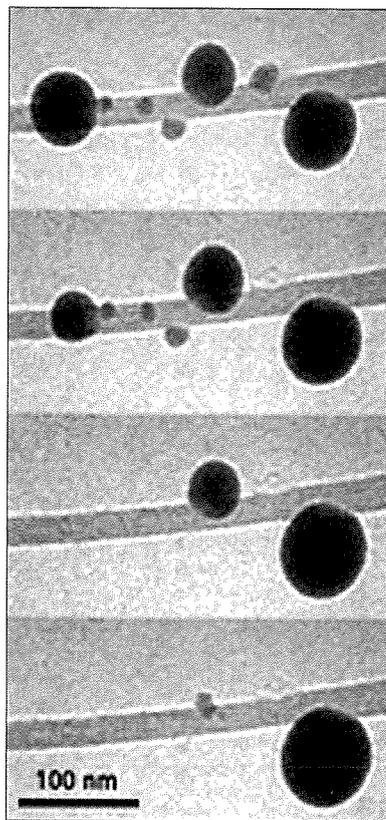
### Utilização da energia solar para a remoção de óleo em praias poluídas

Na sequência do desastroso derrame ocorrido a partir do petroleiro Prestige em Novembro de 2002, um grupo de investigadores da Universidade Autònoma de Barcelona propôs uma nova estratégia para a remoção do crude existente na areia e em rochas. O método fotoquímico descrito por JL Bourdelande et al. [JL Bourdelande, J Marquet, JR Herance, U Balduzzi, Photochem. Photobiol. Sci., 3 (4) (2004), 329] requer a utilização de um sal de ferro  $[\text{Fe}(\text{NH}_4)(\text{SO}_4)_2]$ , peróxido de hidrogénio e... a luz do Sol. Ao mergulhar as rochas contaminadas na solução constituída pelo sal de Fe e  $\text{H}_2\text{O}_2$ , as "bolhas" de oxigénio formadas provocam a remoção do óleo existente à superfície das rochas, produzindo uma espuma oleosa que flutua na solução. A duração deste processo pode variar entre 15 minutos (no escuro) a 8 minutos quando decorre sob a acção da radiação solar. Após este intervalo de tempo, a espuma formada pode ser removida facilmente por aspiração. As rochas que são demasiado grandes para receber o tratamento anterior são pulverizadas com uma solução mais concentrada, sendo a camada oleosa posteriormente removida de forma mecânica. Outros sais foram testados, nomeadamente sais de sódio, por existirem em abundância nas praias, mas é necessário mais tempo para uma limpeza eficaz (cerca de 27 minutos). Além de contribuir para a melhoria das condições ambientais, o método proposto apresenta reduzido impacto ambiental, sendo também simples, rápido e económico.

*Chem. Sci.*, **1**, (2004) C35

### Nano-correias transportadoras

Num artigo publicado na *Nature* (*Nature*, **428**, (2004) 924) por investigadores da Universidade da Califórnia e do Laboratório Nacional Lawrence Berkeley, foi demonstrado que, aplicando uma corrente eléctrica a um nanotubo de carbono de parede múltipla (MWNT), a estru-



tura é transformada numa nano correia transportadora para sais fundidos.

Na figura pode-se observar uma sequência de imagens intervaladas de um minuto, obtidas por microscopia electrónica de transmissão, mostrando índio a deslocar-se da esquerda para a direita através de um nanotubo de carbono. A equipa, constituída pelo físicos Alex Zettl e Chris Regan e seus colaboradores, observaram o referido fenómeno de transferência de massa gerando um circuito eléctrico que passa num MWNT com nanocristais de índio depositados. Um aumento da voltagem aplicada conduz ao aquecimento do tubo e à correspondente fusão dos cristais de índio. Variando a voltagem aplicada e a polaridade da corrente, os investigadores conseguiram migrar o metal ao longo do tubo a uma velocidade e direcção controladas, com distâncias superiores a 2 mm.

O metal não se desloca em gotas discretas, mas, com o tempo, as partículas metálicas próximas do ânodo encolhem, enquanto as partículas próximas do cátodo aumentam. A técnica foi também

usada no transporte de outros metais como o ouro, a platina, o estanho e uma liga estanho-índio.

*Nature*, **428**, (2004) 924

### Nem tudo que reluz é paládio...

Os metais nobres paládio e platina são usados como catalisadores em diversas reacções químicas. Como as reacções ocorrem apenas à superfície das partículas que funcionam como catalisadores, as nanopartículas são de extremo interesse nesta área pois oferecem uma elevada razão entre a área superficial e o respectivo volume. Por outro lado, a sua utilização pode ser extremamente vantajosa se for possível obter partículas cuja parte central é constituída por um material menos dispendioso, revestido pelo metal catalisador. Neste sentido, Son et al. [SU Son, Y Jang, HB Na, HM Park, HJ Yun, J Lee, T Hyeon, J. Am. Chem. Soc., 126, (2004) (16), 5026] desenvolveram uma reacção de decomposição envolvendo tensoactivos e metais que resulta na formação de partículas de níquel revestidas por paládio. Quando uma mistura contendo complexos metálicos com trioctilfosfina (Pd-TOP e Ni-TOP) foi aquecida, observou-se que o complexo Ni-TOP decompõe-se a uma temperatura mais baixa, resultando em nanopartículas de Ni em que Pd é depositado à medida que a temperatura aumenta. A acção catalítica deste material foi testada através da reacção de Sonogashira, que ocorre entre alcinos terminais e halogenetos de arilo ou vinilo. Para quantidades iguais de paládio, as partículas produzidas pela técnica proposta apresentam maior reactividade que aquelas constituídas somente por Pd, sendo possível a sua re-utilização por diversas vezes.

*Science*, **304**, (2004), 361

### Novos potenciais intermediários em catálise enzimática

A análise de raios-X da estrutura de duas metaloenzimas contendo cobre, revelou a existência de complexos contendo ligações entre óxido de azoto e cobre e entre oxigénio e cobre, nunca

antes observados na natureza. Os novos complexos poderão ser intermediários chave dos mecanismos catalíticos destas enzimas.

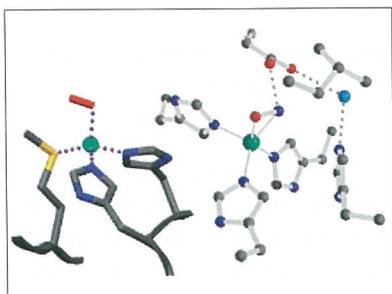
A equipa responsável pela descoberta do complexo Cu-NO (biólogos Michael Murphy e Elitza Tocheva da Universidade de British Columbia, Vancouver), conseguiu isolá-lo numa enzima bacteriana que produz NO a partir do nitrito, a redutase do nitrito (*Science*, **304**, (2004), 867). Os átomos de azoto e de oxigénio da molécula de NO encontram-se quase equidistantes do átomo de cobre (ver figura, lado direito). Segundo Murphy, a redutase do nitrito pode usar o complexo Cu-NO para alterar a coordenação de cobre-oxigénio para cobre-azoto, durante a conversão de NO<sub>2</sub> a NO.

O complexo Cu-O<sub>2</sub> foi observado pelos biólogos Mario Amzel e Sean Prigge, da Escola Universitária de Medicina de John Hopkins, numa estrutura de peptidilglicina- $\alpha$ -hidroxil monooxigenase, uma enzima de cobre envolvida no processamento de hormonas peptídicas (*Science*, **304**, (2004), 864). Neste complexo, uma molécula de O<sub>2</sub> encontra-se ligada a um dos átomos de cobre da enzima por apenas um dos seus átomos de oxigénio (ver figura abaixo). De acordo com Amzel e Prigge, a observação do complexo Cu-O<sub>2</sub> implica que o O<sub>2</sub> se encontra directamente envolvido nos passos de transferência electrónica e de abstracção de hidrogénio da reacção catalisada pela monooxigenase.

*Science*, **304**, (2004), 867

*Science*, **304**, (2004), 864

Verde – cobre, vermelho – oxigénio, azul – azoto  
amarelo – enxofre, cinzento – carbono



### Monitorização por satélite do ozono troposférico

O ozono existente na troposfera é um agente poluidor com efeitos adversos na saúde humana e na agricultura. Os óxidos de azoto (NO<sub>x</sub>) e os compostos orgânicos voláteis (VOCs) constituem as duas classes de compostos precursores do ozono troposférico. A incerteza associada ao seu real papel na produção do ozono – principalmente devido à falta de informação baseada em observações e medições – restringe a implementação de medidas de controlo da poluição atmosférica mais efectivas. Martin *et al.* [RV Martin, AM Fiore, A Van Donkelaar, *Geophys. Res. Lett.*, **31**,(2004), (6), L06120] descrevem uma técnica com potencialidades para diminuir esta incerteza através de um método baseado num sensor remoto espacial, em que é medida a razão entre o formaldeído e o dióxido de azoto existente na troposfera. Esta razão pode ser um indicador que permitirá relacionar a formação de ozono à superfície terrestre com a ocorrência de emissões de NO<sub>x</sub> e/ou de VOCs. Até ao presente, a monitorização deste parâmetro permitiu estabelecer que, durante o Verão, a produção de ozono troposférico está mais relacionada com a emissão de NO<sub>x</sub> do que VOCs na maior parte do Hemisfério Norte, com excepção de Los Angeles e de áreas industriais na Alemanha. Foi também verificada uma mudança sazonal durante o Outono, em que a contribuição dos VOCs foi mais relevante do que a das espécies NO<sub>x</sub>. Estes resultados sugerem que a monitorização remota através de satélites pode contribuir para a gestão da poluição atmosférica por revelar a resposta espacial e temporal da produção de ozono na troposfera à diminuição das emissões de NO<sub>x</sub> e VOCs.

*Science* **304**, (2004), 173,

### Novo ligando para reacções de hidrogenação assimétrica

O ligando apresentado na figura foi sintetizado e testado em reacções de hidrogenação assimétrica catalisadas por

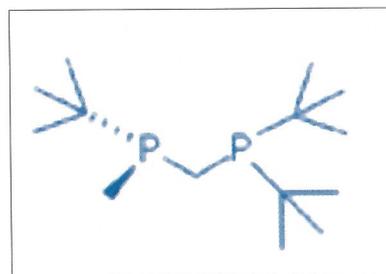
ródio, por Garrett Hoge e colaboradores da empresa Pfizer. Normalmente, os ligandos quirais contendo fósforo usados para a mesma aplicação apresentam simetria C<sub>2</sub>. O novo ligando, denominado pela sua estrutura "trichickenfootphos", tem simetria C<sub>1</sub>.

A equipa de investigadores usou o complexo de ródio do ligando para preparar t-butilamónio (S)-3-ciano-5-metilhexanoato a partir de t-butilamónio 3-ciano-5-metil-3-hexenoato à escala laboratorial (*J. Am. Chem. Soc.*, **126**, (2004), 5996 ).

O composto quiral obtido é um intermediário chave na produção da pregabalina, um candidato a medicamento para tratar a ansiedade e a epilepsia. Para esta aplicação, o novo ligando forma um catalisador que é superior em enantioselectividade que o anterior melhor, que usa Me-Duphos, um ligando cuja propriedade é da Dow Chemical.

Hoge afirma que o ligando é relativamente fácil de preparar e de manusear, esperando que a reacção de produção da pregabalina seja rapidamente conduzida à escala industrial por empresas da indústria farmacêutica.

*J. Am. Chem. Soc.*, **126**, (2004), 5996



### Os segredos do bicho da seda

David Kaplan, do Departamento de Engenharia Biomédica da Universidade de Tufts, Massachusetts, é da opinião de que a melhor forma de produzir fibras resistentes reside na compreensão de como o bicho da seda produz as suas e tentar duplicar o processo.

O elemento crucial desse processo é a água. Mesmo pensando que a seda é

uma das proteínas mais hidrofóbicas, Kaplan, afirma que os bichos da seda usam um sistema pelo qual produzem (e armazenam nas suas glândulas) uma solução de 30% em peso da proteína em água. A água serve como solvente, como plastificante e como meio de processamento.

A observação da seda formada a partir do bicho da seda *Bombyx mori*, revelou a existência de glóbulos consistindo de estruturas tipo micela com diâmetros entre 100 e 200 nm. A sequência primária de uma das proteínas fibróides da seda deverá estar na origem de tal estrutura.

Os investigadores especulam que as proteínas fibróides de regiões hidrofílicas e hidrofóbicas alternadas dobram para formar uma micela fibróide. A parede externa das micelas é constituída por grandes blocos hidrofílicos, enquanto que o seu interior é formado por blocos hidrofóbicos. No entanto, a região interior retém também alguma água, devido a pequenos blocos de resíduos hidrofílicos hidratados que se situam entre os blocos hidrofóbicos. Estes pequenos domínios hidrofílicos mantêm a proteína solúvel em água.

Com o tempo, o bicho da seda produz cada vez mais micelas fibróides e reduz o teor em água da sua solução de seda no processo, o que provoca a aglomeração das micelas em glóbulos, que eventualmente formarão um gel. Nos passos finais da formação da seda, as micelas perdem água, tornando-se o material insolúvel. O bicho da seda alinha as fibras desidratadas enquanto desloca o gel das suas glândulas de produção de seda para o seu equipamento de enrolamento. O grupo de Kaplan conseguiu

duplicar este processo, desidratando os seus filmes de seda com metanol, permitindo-lhes desenvolver novos materiais, como compósitos de hidroxipatite-seda e matrizes porosas de seda que podem ser usadas em engenharia de tecidos.

*Chemical & Engineering News, April 2004*

### **Solvay Ideas Challenge premeia projectos inovadores de raiz académica**

Estimular e premiar projectos inovadores e empreendedores, promover a inovação de base tecnológico-científica entre estudantes, docentes e investigadores universitários e estimular a cooperação entre universidades e empresas é o objectivo do Solvay Ideas Challenge, um projecto da Solvay Portugal, que conta em 2004 com a sua primeira edição portuguesa.

Esta iniciativa ligada à indústria e que visa dar um contributo indiscutível para fazer da inovação um verdadeiro desígnio nacional, contou com 14 candidaturas, 13 nacionais e uma austríaca.

Três dos projectos foram distinguidos, dois ex-aecquo com o primeiro lugar neste concurso e um terceiro com uma menção honrosa, e apresentados publicamente numa cerimónia com entidades oficiais, entre as quais o Presidente da Fundação para a Ciência e Tecnologia, o Presidente do Instituto dos Resíduos e o Reitor da Universidade Técnica de Lisboa. Os vencedores foram:

– "ACETech" – traz à luz uma nova tecnologia limpa, que melhora a produtividade de Dietilacetato, um composto

químico usado na indústria farmacêutica e de perfumaria e, mais recentemente, como aditivo eficaz e menos poluente para o combustível automóvel;

– "AIRSILTEX" – uma nova tecnologia de produção de um novo isolante – aerogel híbrido sílica/polímero – de performance superior aos melhores isolantes actualmente conhecidos, não poluente, e com um processo de produção mais económico, possibilitando a sua ampla utilização na indústria de transformação solar, aeroespacial e aeronáutica, por exemplo.

O primeiro é da autoria do Laboratório de Processos de Separação e Reacção, do Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto; o segundo tem a assinatura do Centro de Química-Física Molecular – Instituto Superior Técnico.

A Menção Honrosa destaca o "ANESTLESS", projecto que visa a recuperação de Xenon – um novo gás anestésico, que traz benefícios de segurança e bem-estar ao doente – após a sua administração clínica. A autoria é da SYSAdvance, uma *spin-off* da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.

Aos dois vencedores ex-aecquo foram reservados prémios de 3 mil euros e para a equipa distinguida com a menção honrosa um montante de mil euros.

*Departamento de Comunicação da Solvay Portugal*

Compilação de Marcela Segundo e Helder Gomes

# Um livro teórico para as aulas práticas

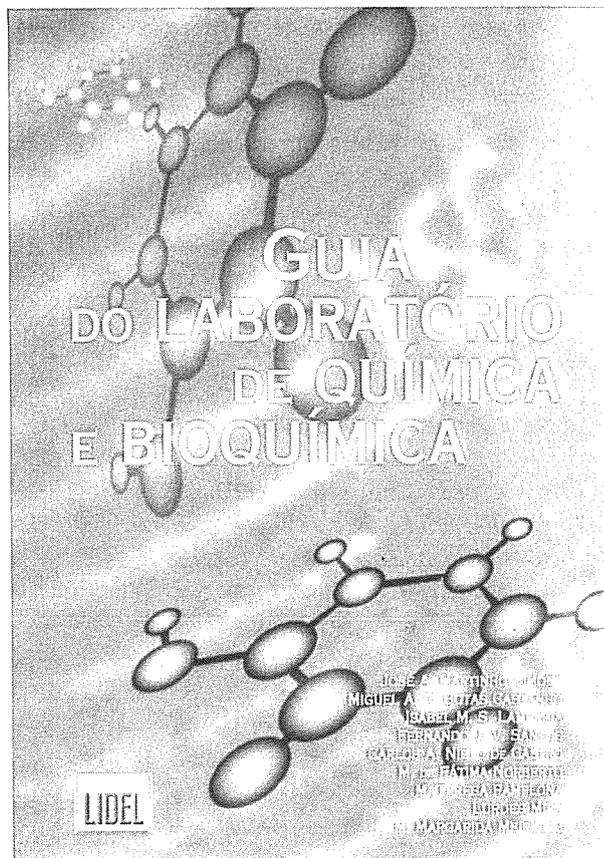
Porque é que este livro é único?

Porque não existe, em português, mais nenhuma obra que trate das regras gerais de "comportamento" num laboratório

Porque chama a atenção para o problema da segurança nos laboratórios

Porque aborda um conjunto de tópicos essenciais que, por falta de tempo, raramente são tratados nas aulas com um nível adequado:

- Elaboração de relatórios
- Pesquisa bibliográfica
- Aquisição automática de dados
- Análise e tratamento de dados experimentais
- Apresentação de dados em gráficos e medida de algumas propriedades



P.V.P.: 2 200\$

Os Direitos de Autor desta obra reverterem a favor da Sociedade Portuguesa de Química

Autores

- José A. Martinho Simões
- Miguel A. B. Bolas Castanho
- Isabel M. S. Lampreia
- Fernando J. V. Santos
- Carlos A. Nieto de Castro

- M. de Fátima Norberto
- M. Teresa Pamplona
- Lúdes Mira
- M. Margarida Meinelles

LIDEL

LIDEL - Edições Técnicas, Lda.

www.lidel.pt

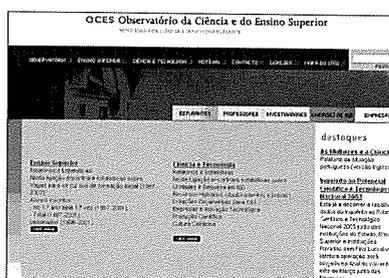
e-mail: promocao@lidel.pt

Lisboa: 21 3541418 \* Porto: 22 5097993/5 / Coimbra: 239 822486

## Observatório da Ciência e do Ensino Superior

[www3.oces.mces.pt/index.php](http://www3.oces.mces.pt/index.php)

Este *site* pertence ao Ministério da Ciência e do Ensino Superior e merece um lugar nos nossos favoritos. A navegação por cada utilizador nestas páginas Web é importante para a avaliação da utilidade do *site* e a localização de tópicos relacionados com interesses específicos. Há uma secção que merece especial atenção referente à base de dados dos doutoramentos finalizados e em curso (entre outros), que permite pesquisar qualquer informação por campos (nome, instituição, domínio, título de tese) em [http://www3.oces.mces.pt/?id\\_categoria=33](http://www3.oces.mces.pt/?id_categoria=33). É ainda possível criar a nossa própria base de dados em Excel graças à possibilidade de exportar os resultados da pesquisa efectuada. Assim a criação de uma lista de pessoas com interesses comuns para contactos futuros torna-se simples. As informações nem sempre estão actualizadas; no entanto, os estudantes de doutoramento ou supervisores que detectem alguma incorrecção podem enviar um *e-mail* para os serviços competentes ([doutoramentos@oces.mces.pt](mailto:doutoramentos@oces.mces.pt)).

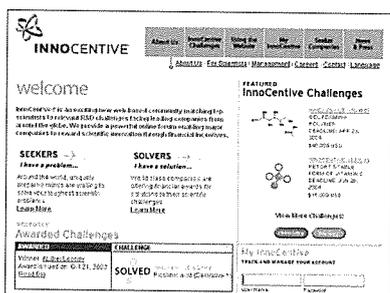


## Innocentive

[www.innocentive.com](http://www.innocentive.com)

Desafios. É o que gostamos nas Ciências. Ainda melhor se o resultado da nossa pesquisa e dos nossos esforços é retribuído. Innocentive propõe-se a ser um intermediário entre as indústrias (que colocam questões) e os investigadores (que produzem respostas).

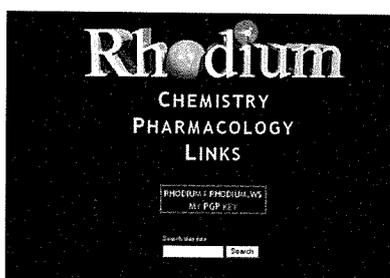
Assim, vários *challenges* em química e biologia encontram-se neste *site* e oferecem um incentivo financeiro em troca da melhor solução a um problema. Esta iniciativa merece uma salva de palmas ao criar laços entre empresas e centros de pesquisa de uma forma tão simples. Uma visita a não perder.



## Rhodium – The Largest Drug Synthesis Archive on the Web

[www.rhodium.ws](http://www.rhodium.ws)

Este *site* é uma mina de informações para os químicos orgânicos e especialmente para aqueles que trabalham em assuntos relacionados com drogas de abuso. Como todas as minas, é quase preciso escavar a informação porque a organização não é o seu ponto forte, embora muitos dados úteis possam ser encontrados com paciência.

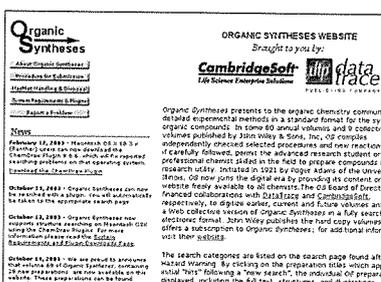


## Organic Synthesis Website

[www.orgsyn.org](http://www.orgsyn.org)

Aqui é proposto de forma mais acessível um serviço semelhante ao dispendioso Beilstein Crossfire conhecido pelos químicos orgânicos. Depois da instalação do *plugin*, é possível pesquisar a base de dados de métodos experimentais em

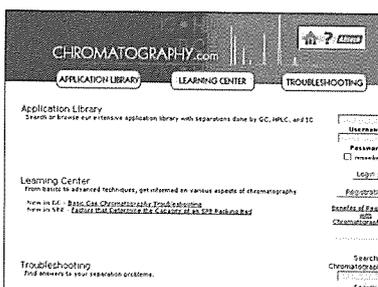
química orgânica desenhando as moléculas numa área própria da janela do navegador Web sem custos. O *site* propõe também um serviço de comunicação rápida em síntese orgânica. As comunicações são publicadas no *site* através da base de dados e em papel pela Wiley. Orgsyn torna-se um ponto de partida essencial numa pesquisa bibliográfica. Ainda é de salientar que o *site* pertence à já famosa CambridgeSoft que comercializa produtos como: Chemdraw, ChemOffice e ChemFinder.



## Chromatography.com

[www.chromatography.com](http://www.chromatography.com)

Propriedade da Alltech, Chromatography.com disponibiliza imensos métodos cromatográficos para vários sistemas de separação (GC, LC, TLC). Os métodos utilizam os produtos comercializados pela firma mas uma pesquisa permite geralmente fazer a correlação com o material de outras marcas e, assim, usufruir de uma lista importante de protocolos de separação. Um outro *site* útil em cromatografia é o *site* da LC GC Europe ([www.lcgeurope.com/lcg-ceurope](http://www.lcgeurope.com/lcg-ceurope)) que, além da sua revista *online*, propõe secções de *troubleshooting*, artigos técnicos e aplicações, entre outros.



**Chemjobs.net: discover the biochemist, pharmaceutical or chemist jobs that are available**

[www.chemjobs.net](http://www.chemjobs.net)

Quem estiver à procura de uma oportunidade para mudar de emprego/actividade vai querer visitar este *site* que existe desde 1999. Chemjobs divulga ofertas de trabalho no mundo inteiro para químicos, bioquímicos e farmacêuticos. É possível receber regularmente

uma lista de colocações disponíveis, segundo um perfil criado durante o registo no *site*, por correio electrónico. As organizações que propõem os empregos são na maior parte dos Estados Unidos ou do Reino Unido, podendo de vez em quando ser encontrada uma oferta em Portugal.

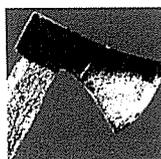
Secção compilada por Christophe Siquet



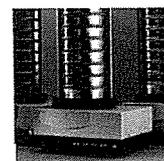
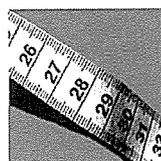
# Retsch



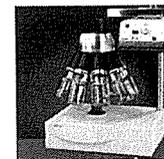
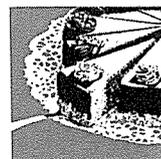
**Moinhos**



**Agitadores de peneiros/peneiros**



**Divisores de amostras**



**Análise granulométrica automática  
CAMSIZER / CRYSTALSIZER**



**Peça-nos o contacto do agente mais próximo, através dos telefones:**

21-352 72 93

22-618 42 32

*O Importador Exclusivo*

LISBOA

PORTO

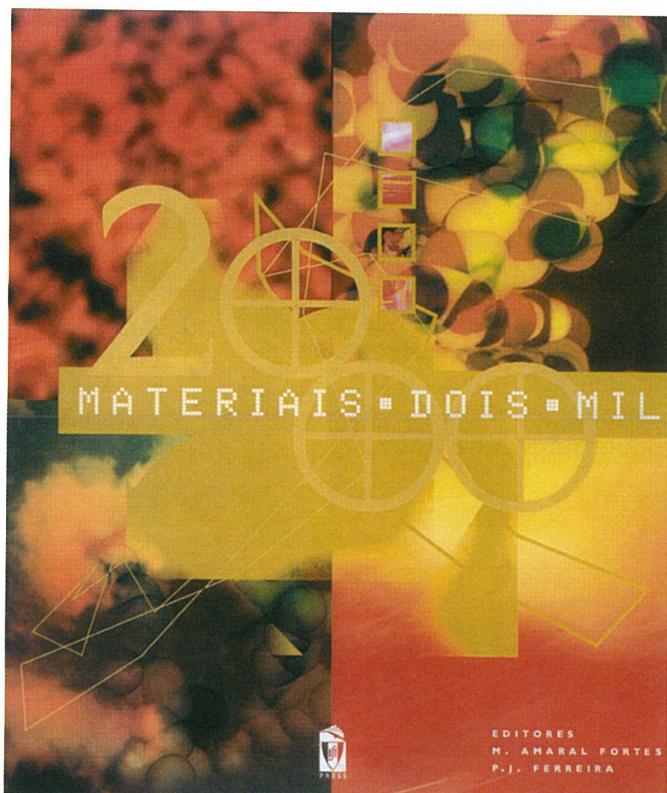
Campo Mártires da Pátria, 109

Rua do Vilarinho, 1235 • 4100-517, Porto

<http://www.en-equipamentos.pt>

# Materiais Dois Mil

RUI TEIVES HENRIQUES



## "Materiais Dois Mil"

Vários autores. Editado por M. Amaral Fortes e P. J. Ferreira. IST Press, 2003, 545 páginas.

Trata-se de uma obra deliberadamente datada. Não para mostrar o que são os novos materiais no início do século XXI — e pareceria estranho incluir capítulos sobre madeira e cortiça ou o diamante — mas para mostrar o olhar actual dos cientistas sobre materiais, sejam eles naturais, fabricados pelo homem desde há séculos ou sintetizados e projectados nos anos mais recentes para terem determinadas propriedades e desempe-

nho, tanto em novas aplicações como em substituição de materiais naturais.

Tentando imaginar, há trinta anos, quando conclui a licenciatura, se tivesse sido editado algo correspondente!? Certamente incluiria capítulos sobre metais, cerâmicos e vidros, polímeros e materiais naturais. O silício e o diamante também poderiam figurar. Não figurariam de certeza os supercondutores de alta temperatura crítica, os quasicristais, os polímeros condutores. Áreas então recentes como as ligas com memória de forma ou os biomateriais poderiam ou não estar incluídas consoante o isolamento do país tivesse sido mais ou

menos quebrado pela pequena comunidade científica. É natural que se inclua o que de novo apareceu, mas mais importante ainda é o olhar novo tanto sobre o que é recente como sobre o que é utilizado como material pelo homem há séculos ou milénios.

O prefácio de Ricardo Bayão Horta evidencia três linhas de força em torno das quais o livro se organiza: a tradicional baseada fundamentalmente na constituição química e em aspectos estruturais, a da funcionalidade ou seja da resposta dos materiais em relação a estímulos exteriores e a visão integradora relacionando os materiais com diversos aspectos da actividade humana e com o ambiente. O livro encontra-se dividido em dez capítulos contendo um total de 49 contribuições.

Trata-se também de uma obra multidisciplinar no conteúdo e na abordagem. Não se nota a primazia nem de um olhar mecânico nem de um olhar químico sobre os materiais. Ou entre o do engenheiro e o do cientista físico ou químico. Mantém ainda um equilíbrio razoável entre a abordagem dos processos de fabrico e a descrição e discussão de propriedades, embora dando mais relevo ao último aspecto.

A inclusão de textos em inglês, numa obra escrita fundamentalmente em português, não parece uma escolha muito feliz. Tanto mais que não é seguramente destinada a especialistas mas almeja atrair o interesse de estudantes em diversas cadeiras de vários cursos onde os Materiais são leccionados, e também um público mais vasto. Para todos, apesar disso, é uma obra valiosa.

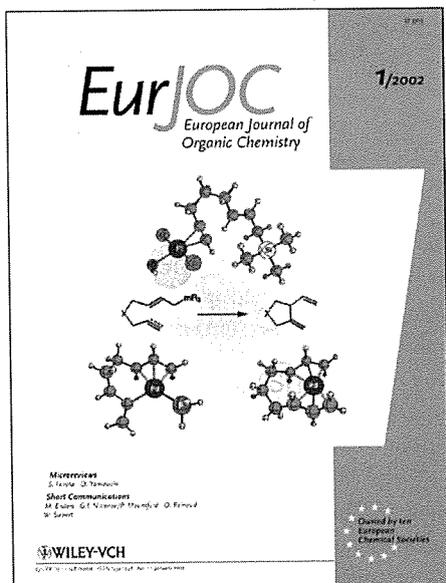
# EurJOC

European Journal of  
Organic Chemistry

## Your Journal

- First Impact Factor: 2.150
- Rapid publication times especially for short communications
- Now supported by ten national chemical societies (Belgium, France, Germany, Greece, Hungary – together with the Hungarian Academy of Sciences, Italy, The Netherlands, Portugal, Spain)
- Authors' work exhibited on the cover
- Attractive personal member subscription rates available; see: [www.EurJOC.com](http://www.EurJOC.com)
- More color

## European Journal of Organic Chemistry



Wiley-VCH  
2002 24 issues  
ISSN Print 1434-193X  
ISSN Electronic 1099-0690

The *European Journal of Organic Chemistry* publishes full papers, short communications and microreviews covering the entire spectrum of synthetic organic, physical organic and bioorganic chemistry, as well as that of natural products. Example microreviews from past and forthcoming issues are listed on this page.

Senior Editor: Henning Hopf  
(Germany)

Order Your Copy now:

Just copy, fill in and fax to:  
+49(0)6201/606-172

- Please send me a free sample print copy
- Please enter our/my 2002 subscription to:  
*European Journal of Organic Chemistry*  
2002, ISSN Print 1434-193X  
2002, ISSN Electronic 1099-0690  
at the institutional rate\*:
- |  |                                    |                                    |
|--|------------------------------------|------------------------------------|
|  | print                              | electronic                         |
| <input type="checkbox"/> Europe              | <input type="checkbox"/> € 2498    | <input type="checkbox"/> € 2498    |
| <input type="checkbox"/> Switzerland         | <input type="checkbox"/> sFr 4328  | <input type="checkbox"/> sFr 4328  |
| <input type="checkbox"/> All other countries | <input type="checkbox"/> US\$ 3158 | <input type="checkbox"/> US\$ 3158 |
- \* For a 5% premium, institutions can choose both print and electronic access.

For members of the owner societies from Belgium, France, Germany, Greece, Hungary, Italy, The Netherlands, Portugal and Spain, at the personal rate:

- |  |                                   |
|--|-----------------------------------|
|  | print                             |
| <input type="checkbox"/> Europe              | <input type="checkbox"/> € 298    |
| <input type="checkbox"/> Switzerland         | <input type="checkbox"/> sFr 588  |
| <input type="checkbox"/> All other countries | <input type="checkbox"/> US\$ 318 |

Prices include postage and handling charges.

Please tick:  private  business

Name

Address

City/Postcode

Country

Membership-No.

Date/Signature

Please return this order to your local bookseller or to:

Customers in Germany, Austria and Switzerland:

Wiley-VCH Customer Service  
P.O. Box 10 11 61,  
D-69451 Weinheim, Germany  
Phone: +49 (0) 6201-606 147  
Fax: +49 (0) 6201-606 172  
e-mail: [subservice@wiley-vch.de](mailto:subservice@wiley-vch.de)

Customers in all other areas:

John Wiley & Sons, Ltd.  
Journals Administration Department  
1 Oldlands Way  
Bognor Regis West Sussex, PO22 9SA,  
England  
Phone: +44 (0) 1243-779 777  
Fax: +44 (0) 1243-843 232  
e-mail: [cs-journals@wiley.co.uk](mailto:cs-journals@wiley.co.uk)

### FREE SAMPLE COPY

The *European Journal of Organic Chemistry* is available online through Wiley InterScience. Visit Wiley InterScience ([www.interscience.wiley.com](http://www.interscience.wiley.com)) for complete details and see the FREE full text virtual sample copy.

 **WILEY-VCH**

# Uma Lição de António Gedeão:

Demonstração<sup>1</sup> e Parábola<sup>2</sup> no poema "Lição sobre a água"

CHRISTOPHER DAMIEN AURETTA

A natureza promoveu a vida consciente neste planeta plausivelmente porque ela quis chegar a ser a incarnação plena de uma pergunta, i.e., a concretização no ser humano de um questionamento mais primordial reflectido, porventura, na capacidade de a natureza se transformar e de se inovar perpetuamente. Por conseguinte, abordamos o mundo nós — criaturas privilegiadas desta capacidade transformativa natural — sob a pressão interna de um estado interrogativo generalizado e inerente ao fluxo evolutivo do universo. Anterior à consciência humana definidora do destino peculiar da nossa espécie, difunde-se *uma sensação do inacabado* que determina, em última instância, a vocação íntima da civilização humana. Somos seres que patenteiam uma consanguineidade essencial com a dúvida, somos vizinhos habituais de um enigma universal que, ora estimula, ora confunde os nossos sentidos. A solução definitiva do enigma ultrapassa-nos (e a história humana, pressente-se, é o rascunho constante das nossas tentativas). Todavia, os conteúdos da nossa consciência são evolutivos porque a atitude interrogativa que nos caracteriza é, acima de tudo, fundadora e criativa: transforma a memória individual em continuidade civilizacional, a angústia da descontinuidade orgânica de criaturas finitas em projecção e acção racionais duradouras. Manifestamos o pensamento em linguagem articulada porque as verdades que inventamos no nosso diálogo com o universo só se deixam entender, em cada instante, em companhia deste mesmo universo. Neste diálogo, nós (em conjunto com o universo que nos rodeia e nos permeia) participamos num processo evolutivo que se realiza perpetuamente num único destino congeminado:

indagamos e questionamos sem trégua porque, na verdade, o enigma é a própria estrutura do mundo<sup>3</sup>. Consequentemente, questionamos porque o acto de questionar constitui e actualiza a essência da natureza humana em si. E este enigma, proliferante e filtrado variadamente pelas linguagens especializadas com que, modernamente, erguemos o nosso saber, não deixa de se nos insinuar com veemência: somos humanos precisamente porque intuimos que a vida é um fenómeno de carácter urgente. A paisagem específica de todo o enigma, de todo o questionamento, é a do precipício: a consciência humana elabora as suas verdades mais vitais quando em queda livre, o destino do ser humano é o de solear o caos com que o enigma se oculta e se revela simultaneamente. Agimos um pouco à semelhança da personagem do Infante D. Pedro da tragédia quinhentista, *Castro*, escrita, como se sabe, pelo humanista português António Ferreira (peça publicada pela primeira vez em 1587). O Infante pede notícias ao seu conturbado mensageiro sobre o estado da sua amante, Dona Inês de Castro:

*Mensageiro*

Ó triste nova, triste mensageiro  
Tens ante ti, senhor.

*Infante*

Que novas trazes?

*Mensageiro*

Novas cruéis; cruel sou contra ti,  
Pois m'atrevi trazê-las. Mas primeiro  
Sossega teu espírito: e nele finge  
A mor desventura, que te agora  
Podia acontecer: que grã remédio  
É ter o espírito armado à má fortuna.

*Infante*

Tens-me suspenso. Conta: que acrescentas  
O mal com a tardança.

*Mensageiro*

É morta Dona Inês, que tanto amavas.<sup>4</sup>

O caos é também criação humana. Somos vocacionados para criá-lo pela via das nossas paixões conflituais. É este caos que sentimos que é preciso compreender sem "tardança". Assim são as verdades que nos desfazem na sua dimensão mais pura e inexplicável, congecinadas como são com as dimensões irredutíveis do nosso destino humano. Contudo, é um caos que os poetas são particularmente vocacionados para habitar e compreender. Uma figura exemplar desta habitação poética chama-se *António Gedeão, alter-ego poético*, recorde-se, de Rómulo de Carvalho (1906-1997), professor de ciências físico-químicas, historiador da ciência bem como da do ensino em Portugal e divulgador pioneiro da ciência cuja obra se concretizou numa vasta bibliografia ao longo de décadas de aturada investigação. António Gedeão inicia a sua antologia poética, organizada pouco antes de Rómulo de Carvalho falecer, com o poema "Homem." Estabelece, assim, logo de início, a tonalidade problemática, o registo tenso e a dimensão, ora oprimida, ora incontornável, deste ser em queda livre que contudo persiste em manifestar-se em palavra para se conhecer:

Inútil definir este animal aflito.

Nem palavras,

nem cinzéis,

nem acordes,

nem pincéis

são gargantas deste grito.

Universo em expansão.

Pincelada de zarcão

Desde mais infinito a menos infinito.<sup>5</sup>

Animal aflito, porquê? Porventura devido ao facto de o ser humano possuir uma natureza que oscila entre a sua capaci-

\* Departamento de Ciências Sociais Aplicadas (DACSA), Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, cda@fct.unl.pt, Quinta da Torre, 2829-516 Caparica, 21-294-8300, x. 10433

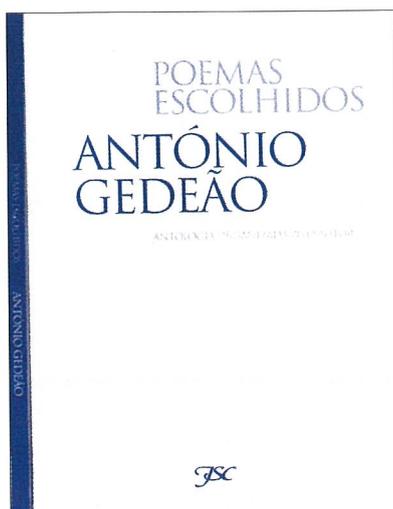


figura 1 Capa de António Gedeão, *Poemas Escolhidos*, Antologia Organizada Pelo Autor, Lisboa: Edições João Sá da Costa, 1996

dade de submeter a realidade circundante a procedimentos lógicos e a operações de abstracção e de quantificação em linguagem matemática, que tornam os fenómenos naturais passíveis de descrição, por um lado, e, por outro lado, uma natureza que lhe permite apenas uma compreensão inacabada de si própria, i.e., o ser humano é portador de uma opacidade irreduzível no próprio seio da sua lucidez objectiva. Cada facto delimitado acarreta um *fatum* que elude toda a redução, toda a quantificação, toda a demonstração definitivas. "Inútil definir" esta condição aflita, porquê? Porque, afinal de contas, a nossa espécie habita porventura este intervalo ontológico entre o demonstrável e o enigmático. A ironia empregue pelos poetas, bem entendido, parte do princípio de que a poesia define precisamente esta condição inclassificável, indefinível. Definir, não: demarca-lhe o seu território, ergue-lhe a sua memória essencial. A poesia devolve-nos o nosso reflexo no instante de olharmos para dentro do incomensurável que funda a nossa consciência. Então, vemo-nos na incumbência de habituar a nossa vista à paisagem do enigma que constitui a condição humana, aos decibéis quase inaudíveis do seu grito, à silhueta movediça do seu ser. Entre a demonstração e a parábola surge uma presença fugidia que a repetição da partícula negativa "nem", no poema "Homem", intensifica. É neste "nem" que, ironia!, uma presença de facto se esboça. No intervalo entre o "mais infinito" e o "menos infinito" vislumbra-se toda uma antropologia angustiada. No interior deste "grito" sussurra-se afinal uma linguagem do ser. Eis o caos soletra-

do...provisória síntese de um corpo pensante que cumpre o seu destino. E não existe subterfúgio de abstracção ou de matematização que apazigue ou escamoteie esta incumbência: daí o papel e o destino da poesia ela própria.

A. N. Whitehead, no seu livro fundamental, *Science and the Modern World*, define o papel da filosofia na nossa modernidade ocidental que tem privilegiado o materialismo científico, veiculando por sua vez um dualismo entre uma realidade exterior, sujeita a uma objectivação que exclui a presença problemática deste "animal aflito", e os estados internos, subjectivos desta mesma criatura que se entroniza num reino sem comunicação nem intervenção com esse mundo exterior: um rei, portanto, sem território para além dos seus próprios estados interiores. Mais: um dualismo que gera dois universos estanques, perfeitamente dissociados, o território do demonstrável sendo o reflexo fiel da concretização da ciência concebida por Bacon, Descartes e, no século seguinte, pelos philosophes do Iluminismo. É, como se sabe, um instrumento de enorme eficácia e aplicabilidade. Mas uma tal racionalidade materialista abdicou de uma vocação maior, no entender de Whitehead, i.e., da de embrenhar o observador e o observado num mesmo drama complexo de presença mútua e inextricável. Whitehead, perante esta situação, que considera a velha conceptualização dualista em plena erosão sob o efeito da evolução da física no século vinte, escreve da seguinte maneira no intuito de elaborar as bases filosóficas de uma nova conceptualização e ampliação da ciência sobre bases detentoras de uma racionalidade mais viva:

"The discrepancy between the materialistic mechanism of science and the moral intuitions, which are presupposed in the concrete affairs of life, only gradually assumed its true importance as the centuries advanced."

E, numa passagem posterior:

"I hold that philosophy is the critic of abstractions. Its function is the double one, first of harmonising them by assigning to them their right relative status as abstractions, and secondly of completing them by direct comparison with more concrete intuitions of the universe, and thereby promoting the formation of more complex schemes of thought. It is in respect to this comparison that the testimony of great

poets is of such importance. Their survival is evidence that they express deep intuitions of mankind penetrating into what is universal in concrete fact. Philosophy is not one among the sciences with its own little scheme of abstractions which it works away at perfecting and improving. It is the survey of sciences, with the special object of their harmony and their completion. It brings to this task, not only the evidence of the separate sciences, but also its own appeal to concrete experience. It confronts the sciences with concrete fact."

António Gedeão, o "amigo de infância" de Rómulo de Carvalho, parece-nos dotado de uma consciência afim à de Whitehead, i.e., uma consciência sensível à necessidade de aproximar as energias demonstrativas, explicativas da linguagem da ciência natural às energias de ordem moral numa síntese nova e mais complexa, fruto de uma racionalidade, ousamos afirmar, em que o analítico e o intuitivo, o demonstrável e o irreduzível se determinem mutuamente num acto de compreensão intensificada, i.e., no acelerar da consciência indagadora de modo a transformar o carácter parcial, fragmentado, dos nossos saberes num todo possível. A poesia de Gedeão, por sua vez, funda-se na pedagogia profunda que esta conceptualização implica: conduzir o leitor a reconhecer que os territórios do quantificável e do irreduzível presentes no ser humano não se opõem. Assinale-se que estes territórios vivem numa relação de contiguidade tensa, em ruptura cognitiva porque perdeu-se de vista a sua convergência possível. A poesia, à semelhança da missão da filosofia na era moderna segundo o pensamento de Whitehead, procura frequentemente aproximar a racionalidade abstracta dos conteúdos concretos da existência: situa o saber num contexto mais amplo, perpassado incontornavelmente pela realidade viva daquele "homem" do poema anteriormente citado. Para que tal aconteça, à intensificação da nossa consciência indagadora, todo o seu efeito acelerador sobre os conteúdos do pensamento já assentes, deve suceder-se uma experiência de súbita e incontornável caducidade deste saber anteriormente demonstrado e exposto.

Num texto datado de 1958, escrito oito anos antes do poema "Lição sobre a água" (publicada na colectânea *Linhas de Força*, em 1967), intitulado "Ciência e

Arte", Rómulo de Carvalho já aborda esta questão de um modo lúcido. Face ao indivíduo moderno, o autor descobre que

"[n]o mesmo homem uns elementos dormem, outros labutam, outros comentam, outros observam, todos em graus de evolução diferentes, sujeitos a desfasamentos tão flagrantes e inesperados que chegam a tornar desesperado o acto de conhecer alguém. Surpreende a atitude de uma mesma criatura perante os problemas vários da existência e se defronte de um se mostra da mais aguda sensibilidade, defronte de outros pode portar-se como o mais insensível dos viventes. Em cada um o homem-cientista, o homem-técnico, o homem-político, o homem-religioso, o homem-artista, e quantos mais, vivem na serena ignorância uns dos outros, alheios em si mesmos, evoluindo separadamente como se fossem representantes de épocas históricas distintas. No mesmo homem pode encontrar-se a mentalidade de um cientista do século XX reunida à mentalidade de um político do século XIX, de um retórico do século XVIII, de um moralista do século XVII, etc. Tal indivíduo (e parecem-nos frequentes estes exemplos) evoluiu muito diferentemente nos múltiplos aspectos que ao mesmo homem são dados conseguindo-se até aliar a brutalidade primitiva à mais requintada civilização moderna."<sup>8</sup>

Uma consciência da disparidade interna – das suas incoerências e da sua perplexidade inarticulada – associada ao ser humano moderno acompanha o pedagogo Rómulo de Carvalho bem como o poeta António Gedeão. Juntos inquiram sobre o território humano que, ora se deixa embrutecer, ora exibir uma extraordinária sofisticação intelectual. Juntos procuram exemplificar o que consideram ser o irrefutável ponto de partida para cada um poder realizar a sua tarefa essencial de acelerador da cultura: "Ambos [artista e cientista] desempenham na sociedade o mesmo papel de construtores, de descobridores, de definidores: um, do mundo de dentro; outro, do mundo de fora." Mas, como fazermos com que a demonstração e a parábola pertençam ao mesmo horizonte cultural, à mesma "velocidade" cognitiva, ao mesmo acto de inteligência de potencialização elevada? Especialmente quando consideramos que o dualismo a que se tem referido tem ren-

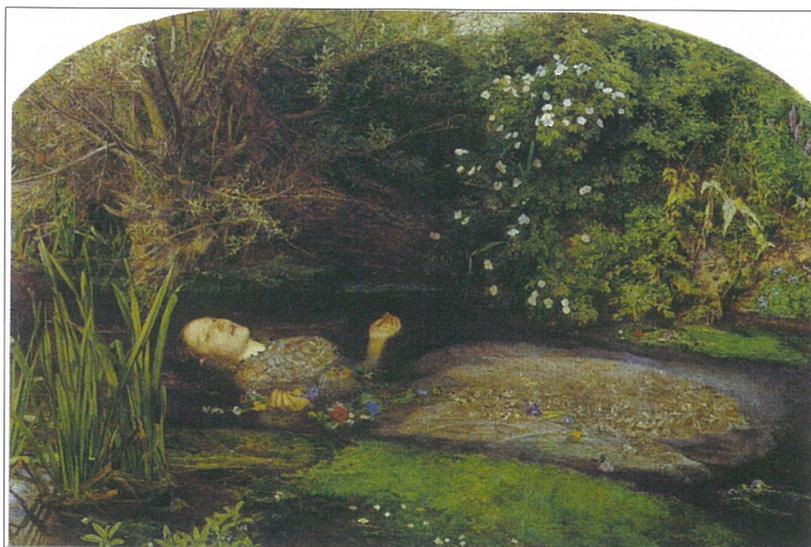


figura 2. Ophelia (1851-2), SIR JOHN EVERETT MILLAIS, BT – Óleo sobre tela 76.2x11.8 cm, Tate Gallery.

dido resultados tão significativos para a nossa modernidade tecnico-científica?

Em retrospectiva, temos indícios literários anteriores à obra de António Gedeão que sugerem atitudes estéticas bem diferentes da do autor de "Lição sobre a água". Refira-se de passagem um autor como Eça de Queirós, escritor criador do realismo português, grande espírito cosmopolita, expoente mor de uma época em que a ciência acreditava na realização iminente de uma ciência completa. Refira-se primeiro, contudo, a fim de estabelecer uma ponte entre a *ciência* e a *literatura* (uma ponte que se tem tornado cada vez mais urgentemente sentida no mundo académico, pois procura articular uma compreensão da evolução interna das disciplinas científicas, os seus pontos de contacto insuspeitos, a urgência de diálogo cultural e disciplinar entre saberes considerados até agora radicalmente separados), refira-se, dizíamos, uma figura, por exemplo, como a de Thomas Henry Huxley — médico, anatomista, zoólogo, botânico, *gentleman of science* e grande defensor das ideias darwinianas — que faz da verificação a operação culminativa, inevitável e definitiva de cada campo científico e do seu progresso disciplinar individual. Ao lermos o ensaio intitulado "On The Educational Value Of The Natural History Sciences," por exemplo, apercebemo-nos rapidamente de que Huxley deixa transparecer em cada frase e em cada afirmação um tom de confiança e de optimismo no que respeita ao progresso do saber científico. Muni-do da crença na universalidade suprema de um método (científico) infalível, con-

fiantes no erguer ininterrupto de uma ciência baseada na irrefutabilidade da verificação, imbuído de uma sensação de acabamento iminente da ciência devido à sua comprovada eficácia interna e ao aperfeiçoamento contínuo dos seus instrumentos de análise, o cientista transmite uma sensação de inevitabilidade da certeza. Daí que, ao lermos os seus ensaios de divulgação científica, ficamos com a impressão de que a ciência se tornou, para a cultura da segunda metade do século dezanove, uma espécie de epopeia triunfal: a ciência incarna uma narrativa de conquistas, ao alcance de todo o indivíduo suficientemente inteligente e motivado:

"So, the vast results obtained by Science are won by no mystical faculties, by no mental processes, other than those which are practised by every one of us, in the humblest and meanest affairs of life. A detective policeman discovers a burglar from the marks made by his shoe, by a mental process identical with that by which Cuvier restored the extinct animals of Montmartre from fragments of their bones. Nor does that process of induction and deduction by which a lady, finding a stain of a peculiar kind upon her dress, concludes that somebody has upset the inkstand thereon, differ in any way, in kind, from that by which Adams and Leverrier discovered a new planet."<sup>10</sup>

Ora, no conto "Civilização" de Eça de Queirós, um texto onde se vê de forma embrionária o seu futuro romance, *A Cidade e as Serras*, de 1901, o escritor re-

flecte esta cultura de confiança científica transposta agora na sua linguagem ficcional. O mundo que o protagonista Jacinto — grande adepto da modernidade tecnológica do seu tempo — habita, é marcado pela cristalização desta confiança numa realidade onde proliferam os objectos na sua solidez plácida, na sua serenidade *objectal*, na sua maturidade verbal. O mundo de Jacinto reflecte a "epopeia" de um saber que se traduz sem pausa e sem dificuldade em "civilização": o olhar realista desvela um mundo ficcional onde a observação do escritor outorga uma plenitude objectiva imediata às coisas. E esta plenitude objectiva é o seu centro primordial de verificação, a prova material da sua verdade. Jacinto constitui a aliança perfeita entre a tecnologia e a vontade pessoal: ele é a encruzilhada corpórea de uma mesma e única identidade onde o mundo exterior e mundo psicológico se unem e se afirmam:

"Nunca recordo sem assombro a sua mesa, recoberta toda de sagazes e subtis instrumentos para cortar papel, numerar páginas, colar estampilhas, aguçar lápis, raspar emendas, imprimir datas, derreter lacre, cintar documentos, carimbar contas! Uns de níquel, outros de aço, rebrilhantes e frios, todos eram de um manejo laborioso e lento: alguns, com as molas rígidias, as pontas vivas, trilhavam e feriam: e nas largas folhas de papel "Whitman" em que ele escrevia, e que custavam quinhentos réis, eu por vezes surpreendi gotas de sangue do meu amigo. Mas a todos ele considerava indispensáveis para compor as suas cartas (Jacinto não compunha obras) assim como os trinta e cinco dicionários, e os manuais, e as enciclopédias, e os guias, e os directórios, atulhando uma estante isolada, esguia, em forma de torre, que silenciosamente girava sobre o seu pedestal, e que eu denominara o Farol. O que, porém, mais completamente imprimia àquele gabinete um portentoso carácter de civilização eram, sobre as suas peanhas de carvalho — a máquina de escrever, os autocopistas, o telégrafo Morse, o fonógrafo, o telefone, o teatofone, outros ainda, todos com metais luzidios, todos com longos fios. Constantemente sons curtos e secos retiniam no ar morno daquele santuário. Tique, tique, tique! Dlim, dlim, dlim! Craque, craque, craque! Trrrr, trrrr, trrrr!... Era o meu amigo comuni-

cando. Todos esses fios mergulhados em forças universais transmitiam forças universais. E elas nem sempre, desgraçadamente, se conservavam domadas e disciplinadas! Jacinto recolhera no fonógrafo a voz do conselheiro Pinto Porto, uma voz oracular e rotunda, no momento de exclamar com respeito, com autoridade:

— *Maravilhosa invenção! Quem não admirará os progressos deste século?*"<sup>11</sup>

Uma união entre a personagem e a tecnologia que, todavia, o romancista parece sujeitar a um processo de ironização e de crítica, pois Jacinto, devido a uma série de percalços, vai redescobrir o mundo rural português, leia-se pré-tecnológico, e, às tantas, revitalizador onde ele irá subseqüentemente simbolizar o homem renascido pelo seu contacto com a Natureza: liberto finalmente dos artifícios e do fardo de uma civilização que lhe sugara toda a vitalidade, bloqueando-lhe a livre expressão dos seus instintos mais salubres. Contudo, esta "conversão" da sensibilidade da personagem não invalida a relação por nós estabelecida entre a ciência e a literatura no caso de Eça de Queirós, antes o reforça. Eça ironiza o destino de Jacinto para mais profundamente perfilar uma estética em que o romancista se apresenta como o árbitro final e irrefutável da realidade que aborda, como o portador de um saber completo no que respeita à realidade social dos indivíduos, do seu destino e da sua interioridade. O romancista realista patenteia uma atitude de onisciência narrativa, um método, um conhecimento e uma precisão de observação supremos, rememorativos dos do cientista da mesma época. Não afirmava Huxley que a ciência pertencia ao mundo do "common sense", do mundo comum dos homens e das mulheres? Consequentemente, o mundo exterior e o mundo interior captados pelo romancista movem-se, por assim dizer, à mesma velocidade de percepção: o objecto e o sujeito aliam-se num funcionamento de natureza perpétua, inconscientes, digamos, da segunda lei da termodinâmica que impõe a inevitabilidade da entropia, i.e., da degradação de energia e do consumo irreversível, do desgaste universal. No universo de Eça, pelo contrário, o universo oferece ao leitor uma solidez e uma plenitude significativas sem ruído. Eça mobiliza o universo com a matéria prima da palavra: a linguagem da narrativa espelha e supera a da própria ciência por-

que pode penetrar até no interior das suas personagens e ironizar o materialismo científico de que a sua arte de narrar se nutre. Esta arte, portanto, é um instrumento veloz, impérvia à caducidade e voraz de certezas. E a certeza coincide exactamente com a ilusão de denotação da linguagem. É esta a grande façanha do realismo do século dezanove: afasta a entropia da dúvida, prolifera sempre mais velozmente do que os efeitos corrosivos da instabilidade inerente ao real. O real continuava a ser para o realista um espelho de imutabilidade e de imperturbabilidade capazes de governar o real e de delimitar os hábitos correctos de cognição bem como os contornos definitivos da verdade. O romancista submetia a sua escrita a esta lei metódica e única da sua arte. Assim, estética e ciência iluminam-se num mesmo impulso épico; atingem em conjunto uma momentânea e ilusória áurea de completude num dado momento da história cultural ocidental. (Basta apenas lembrar, por exemplo, que é em vésperas do novo século vinte que Max Planck descobre a natureza descontínua da energia — os quanta —, não previsto pelos seus contemporâneos, demolindo *malgré lui* a conceptualização clássica da física. Uma descoberta que afasta a imagem de completude conceptual da ciência que até então reinava.)

É Álvaro de Campos, heterónimo de Fernando Pessoa, engenheiro naval imbuído pelas energias da sociedade tecnológica do século vinte e igualmente pelas energias estéticas do Modernismo para a qual Portugal contribuiu de modo ímpar, que representa uma das primeiras vozes literárias a assinalar a dissonância psicológica e a tensão cognitiva provocadas pela conjugação nunca verdadeiramente resolvida entre os imperativos do materialismo científico, o dualismo que o materialismo desencadeava entre objecto e sujeito, e o realismo instrumentalista que impunha à linguagem (e que Eça tão profundamente explorara) parâmetros demasiado restritivos face às indeterminações e às profundezas ainda por explorar da natureza psíquica e social do ser humano. Os heterónimos representam uma ruptura em relação à linguagem poética então reinante; a obra poética de Pessoa não exprime uma realidade já produzida — com as suas respectivas verdades —, uma realidade que apenas passa a "citar". A poesia pessoana deixa de ser o espelho de uma realidade captada de forma completa pela inteligência autorial,

mas antes compartilha com o real as suas energias produtivas. É fundamentalmente heterodoxa e refractária às classificações anteriormente estabelecidas. O poema já não demonstra as causas e os efeitos de um mundo estável e epistemologicamente fixo, mas antes o fluxo de significados que a linguagem poética descortina quando esta se encontra liberta das imposições do realismo. As suas energias são centrífugas em relação a toda a suposta solidez do real. Álvaro de Campos reflecte a ruptura epistemológica que demoliu todas as certezas científicas no primeiro quartel do século vinte, quer no âmbito das ciências naturais, quer no da criação estética. É no "Ultimatum" de 1917, texto que Pessoa atribui a este heterónimo, que se evidencia o terreno literário fértil do qual emergiu uma voz como a de António Gedeão relativamente à fragmentação da sensibilidade do cidadão moderno. Nesta fragmentação, Gedeão articula a sua discreta pedagogia (com suma ironia) a fim de deixar vislumbrar o cidadão potencial, portador de uma consciência menos cindida. Campos, menos discreto, invectiva e vocifera neste manifesto futurista, texto ao mesmo tempo providente e maniaco, arguto e caótico, características associadas à sensibilidade modernista, erguendo-se contra toda uma "sintaxe" (civilizacional) novecentista. No meio das suas invectivas, Campos aventa uma teoria sociológica capaz de diagnosticar o *mal-de-siècle* e os passos a dar de futuro de modo a se poder criar uma sociedade de pura velocidade mental (leia-se, uma sociedade onde domina o novo cidadão-filho da civilização tecnico-científica):

"Ora a sensibilidade, embora varie um pouco pela influência insistente do meio actual, é, nas suas linhas gerais, constante, e determinada no mesmo indivíduo desde a sua nascença, função do temperamento que a hereditariedade lhe infixou. A sensibilidade, portanto, progride por gerações. As criações da civilização, que constituem o «meio» da sensibilidade, são a cultura, o progresso científico, a alteração nas condições políticas (...); ora estes – e sobretudo o progresso cultural e científico, uma vez começado – progredem não por obra de gerações, mas pela interacção e sobreposição da obra de indivíduos, e, embora lentamente a princípio, breve progredem ao ponto de tomarem proporções em que, de geração em geração, cente-

nas de alterações se dão nestes novos estímulos da sensibilidade, ao passo que a sensibilidade deu, ao mesmo tempo, só um avanço, que é o de uma geração, porque o pai não transmite ao filho senão uma pequena parte das qualidades adquiridas." <sup>12</sup>

Este texto dotado de uma elevada capacidade diagnóstica da modernidade abre tremendamente os horizontes da percepção estética bem como problematiza todos os hábitos cognitivos previamente assentes. A linguagem poética moderna conduz-nos inevitavelmente à incerteza e à indeterminação. A sua prodigiosa força inovadora reside na sua não-aceitação dos lugares comuns estéticos do realismo codificado. Daí a luz invulgar que esta poesia projecta sobre as coisas: uma luz quasi inumana, irreconhecível e ao mesmo tempo reveladora de níveis de realidade insuspeitadas pelo realismo anterior, tão enraizado no materialismo científico do século dezanove. Quem leia a poesia de Álvaro de Campos não sai incólume! A sua voz emergente nos primórdios do século vinte possui as dimensões de uma verdadeira odisseia. Os territórios cognitivos que estrutura reflectem a paisagem cultural do mundo a que agora chamamos contemporâneo.

Retenham-se as noções de desadaptação, de sensibilidade e de estímulos de sensibilidade que informam o texto de Campos: sugerem todo um léxico crítico que a seguir poderão enriquecer a nossa leitura do poema, "Lição sobre a água" de António Gedeão que, a seguir, passamos a citar na íntegra:

Este líquido é água.

Quando pura

é inodora, insípida e incolor.

Reduzida a vapor,

sob tensão e alta temperatura,

move os êmbolos das máquinas que, por isso,

se denominam máquinas de vapor.

É um bom dissolvente.

Embora com excepções mas de um modo geral,

dissolve tudo bem, ácidos, bases e sais.

Congela a zero graus centesimais

e ferve a 100, quando à pressão normal.

Foi neste líquido que numa noite cálida de Verão,

sob um luar gomoso e branco de camélia,

apareceu a boiar o cadáver de Ofélia, com um nenúfar na mão.<sup>13</sup>

O poema parece dramatizar à sua maneira a sua própria desadaptação interna: por um lado, as duas primeiras estrofes exemplificam uma linguagem denotativa, desprovida de todo o dramatismo (que a figura feminina de "Ofélia", personagem da tragédia seiscentista de Shakespeare, *Hamlet*, sugere), uma linguagem eficaz e transmissora de aspectos do fenómeno físico-químico chamado água. Estabelece-se um ritmo sintáctico, uma "velocidade" de significação apropriada para a comunicação de uma certeza científica elementar. O poema parece à primeira leitura contentar-se com uma demonstração do comportamento físico da água, serenamente apresentada numa "lição" pedagógica. Na realidade, nada parece perturbar a superfície demonstrativa das duas primeiras estrofes do poema. Contudo, o poema introduz uma segunda "velocidade" cognitiva dentro do poema: faz com que a lição seja contígua no espaço e no tempo com um drama de natureza bem diferente da primeira parte. É precisamente a introdução da figura de "Ofélia," e o elemento trágico de que ela é portadora, que torna opaca a superfície demonstrativa inicialmente transmitida. É a contiguidade das duas partes do poema — a tensão incontornável que a caracteriza — que transforma a primeira parte do poema em cognição subitamente incompleta. O poema *encerra a sua própria caducidade*. Lidas separadamente as duas partes do poema, o leitor ainda poderia fugir a esta sensação de caducidade, de precipitação para dentro da incerteza. Porém, lidas na sua contiguidade, o poema forma o seu próprio abismo: encontramos-nos em queda livre! A perplexidade que o poeta instaura no poema é semelhante à que caracteriza o ser desadaptado referido por Campos: a nossa situação cultural busca uma linguagem que englobe a objectividade da água e a subjectividade fantasmática de Ofélia. Formando parte do mesmo texto poético, Gedeão parece sugerir que esta linguagem global ainda por elaborar aguarda, como aguardava já na poesia de Pessoa, a sua efectiva elaboração. A lição desta "lição" sobre a água exemplifica as duas velocidades inerentes à experiência da época moderna. Por um lado, os estímulos — prodigiosos — da sensibilidade referidos por Campos, i.e., os do progresso científico e, por outro lado, a sensibilidade em si, imbuída de uma memória geracional resistente à progressão cada vez mais acelerada da modernidade científi-

ca. Na verdade, como se pode escrever poesia modernamente se não se reflectir a desadaptação interna, que a modernidade, ela própria, engendra?

A compreensão de nós próprios e do mundo depende da articulação das linhas de força inerentes à nossa modernidade científica. O grau de ignorância, a amplitude e vitalidade eventuais do nosso saber e a natureza ambígua dos nossos estímulos culturais estão a ser determinados em conformidade com a nossa (in)capacidade de elaborar instrumentos analíticos e intuitivos numa direcção unitiva. Whitehead, o filósofo citado, diagnosticava o nosso saber moderno como sendo ainda desprovido de "directive wisdom." A lição de António Gedeão, neste poema ambíguo onde a transparência se torna opaca no momento de ampliar o acto de apreensão, impossibilita a auto-suficiência das certezas demonstrativas. Aliás, Rómulo de Carvalho, no texto "Arte e Ciência" critica a nossa fé na equivalência entre demonstração e compreensão:

"Temos de reparar, entretanto, que demonstrar não é tornar claro nem entendível um conhecimento científico, é apenas o desenrolar de uma técnica que se destina a enquadrar um certo conceito num plano histórico de aquisições perfeitamente articuladas entre si, que não ferem a lógica na sua articulação, e que, pela fluidez com que decorrem umas das outras, nos dão a impressão de que conduzem a coisas acessíveis ao nosso entendimento. (...) Mas a verdade é que é só por intermédio de semelhantes ingenuidades que edificamos o aparato da nossa pseudo-compreensão."<sup>14</sup>

Juízo justo sem dúvida. Qual seria a melhor parábola para acompanhar esta demonstração severa da nossa inteligência desunida? Porventura a que se resume da seguinte maneira: o saber, bem como a(s) linguagem(ns) que o veicula(m), tem necessariamente de promover um processo de interiorização. O saber não amadurece, não atinge a sua velocidade potencial se não se nos impuser como questionamento urgente a que o amor procura responder sem "tardança". Toda a aprendizagem cultural real passa pela capacidade de questionar, de entrar em queda livre em relação às certezas fixas, e que os automatismos das aprendizagens mais superficiais suprimem. Estamos idealmente sempre em vias de encontrar modos de abordar o real que reúnam in-

sights onde a análise e a intuição estética formem um todo inextricável, onde o objecto e o sujeito co-protagonizem e impulsionem uma mesma pedagogia do ser, onde a linguagem especializada e uma consciência moral se completem numa visão rica de tensões e depuradas de brutalidade: onde Ofélia morra e ressuscite vezes sem conta num renovar ininterrupto de paixão indagadora.

#### Notas:

<sup>1</sup> No *Dicionário Etimológico da Língua Portuguesa*, preparado sob os cuidados de José Pedro Machado, "Demonstração" denota o "acto de mostrar, demonstração, descrição". (Livros Horizonte, 1990, p. 300) O verbo "demonstrar" denota portanto o acto de "mostrar, expor, descrever, mencionar" (p. 300). Associa-mos no âmbito deste artigo o universo da demonstração a um acto analítico que se deixa delimitar de modo completo, i.e., a um território de significação obediente a critérios de plena demarcação e de transparência lógicas.

<sup>2</sup> "Parabolé" dá origem ao vocábulo "palavra" em língua portuguesa. O seu universo semântico denota: "comparação, aproximação; daí, parábola, discurso alegórico; encontro, baque, choque; acto de se afastar do caminho direito; projecção (dos raios solares); conjugação de astros; em *geometria*, parábola, secção cónica; paralelograma construído sobre uma linha recta dada; em *aritmética*, divisão". (op. cit., p. 283)

<sup>3</sup> Um dos fragmentos atribuídos ao filósofo pré-socrático, Heráclito, aponta de forma sucinta para este carácter enigmático e, contudo, íntimo que estrutura a consciência humana:

"They are separated from that which they are in the most continuous contact."/ (Vivem separados daquilo com que mais entram em contacto.) (In: Heraclitus, *Fragments A Text and Translation with a Commentary by .M. Robinson*, Toronto: University of Toronto Press, 1991, p. 45.)

Indique-se precisamente esta proximidade e separação, esta intimidade e alienação daquilo que estrutura e funda a consciência humana e que faz com que todo o pensamento seja ao mesmo tempo demonstração dos processos naturais susceptíveis de observação e reflexo de processos internos do observador. Somos os protagonistas das indagações que efectuamos em relação ao mundo e, também, personagens de um drama sem título onde consciência e perplexidade se confrontam, digladiam e cumprem o seu destino terrestre.

<sup>4</sup> António Ferreira, *Castro, Poemas Lusitanos*, (org.) Silvério Augusto Benedito, Biblioteca Ulisseia de Autores Portugueses, 1989, pp. 229-230.

<sup>5</sup> António Gedeão, *Poemas Escolhidos, Antologia Organizada Pelo Autor*, Lisboa: Edições João Sá da Costa, 1996.

<sup>6</sup> A parábola possui uma história linguística extremamente interessante, abrangendo os

universos matemático e moral, portadora portanto de um alcance cultural complexo. Por um lado, significa etimologicamente o acto de atirar para o lado: [*para*] que significa "ao lado de" e [*bolein*] que significa "atirar." A designação de uma curva significava para os gregos precisamente este acto de "atirar ao lado de." A designação da curva referia-se ao facto de ela ser atirada para o lado. A parábola significava igualmente, e por extensão, o acto de pôr em paralelo, de comparar e de recolher.

É a partir deste sentido que a parábola se evidencia na Bíblia. A parábola define uma narrativa curta que encerra uma mensagem de natureza moral, apontando por conseguinte para a estrutura inerente da expressão parabólica na tradição religiosa, i.e., uma superfície verbal que oculta e que conduz o ouvinte/leitor à elucidação de um sentido secundário que transmite uma verdade de índole moral. Recorde-se igualmente que toda a "palavra" encerra na sua etimologia esta mesma parábola. Quer dizer, a comunicação quotidiana torna manifesta esta travessia e esta actualização de dois universos agora contíguos: o mais abstracto e o mais carnal imagináveis. É esta contiguidade expressa no próprio termo "parábola" que subjaz à poética de António Gedeão, i.e., a contiguidade de universos discursivos desgraçadamente esquecida amiúde pelo especialista que, cada um de nós, fatal e necessariamente é.

Para uma introdução fascinante à etimologia do vocabulário matemático mais frequentemente empregue e a sua surpreendente presença na linguagem comum, veja-se Bertrand Hauchcorne, *Les Mots et les Maths, Dictionnaire historique et étymologique du vocabulaire mathématique*, Paris: Ellipses Édition Marketing).

<sup>7</sup> Alfred North Whitehead, *Science and the Modern World*, Cambridge: Cambridge University Press, 1933).

<sup>8</sup> Rómulo de Carvalho, *Colectânea de Estudos Históricos (1953 – 1994)*. Universidade de Évora, 1997, p. 437.

<sup>9</sup> Op. cit., p. 435.

<sup>10</sup> Thomas Henry Huxley, *Man's Place In Nature And Other Essays*, (intro.) Sir Oliver Lodge, London: J.M. Dent & Sons Limited, - 81906-9, 1903, p. 269.

<sup>11</sup> Eça de Queirós, *Contos Escolhidos*, (org.) Maria das Graças Moreira de Sá, Biblioteca Ulisseia de Autores Portugueses, 2000, p. 99.

<sup>12</sup> Fernando Pessoa, *Textos de Intervenção Social E Cultural, A Ficção dos Heterónimos*, (org.) António Quadros, Lisboa: Publicações Europa-América, p. 93.

<sup>13</sup> António Gedeão, *Poemas Escolhidos, Antologia Organizada Pelo Autor*, Lisboa: Edições João Sá da Costa, 1996, p. 62.

<sup>14</sup> Rómulo de Carvalho, *Colectânea de Estudos Históricos (1953 – 1994)*, Universidade de Évora, 1997, p. 440.

# O XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

JOÃO SÉRGIO SEIXAS DE MELO \*

Decorreu nos passados dias 15, 16 e 17 de Abril, em Coimbra, o XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química (XIX SPQ). O último Encontro Nacional realizado em Coimbra datava já do ano de 1991, pelo que este criou uma atmosfera especial em todos quantos o organizaram. O XIX SPQ ultrapassou as expectativas quanto ao número de participantes. Na nossa base de dados ficou registado o número 490 (!), mas foi claramente visível que muitos outros colegas foram aparecendo pontualmente no Auditório contribuindo muito positivamente para engrossar a plateia. Este era um número com o qual os organizadores não contavam. O número inicialmente estimado era de 350 participantes e

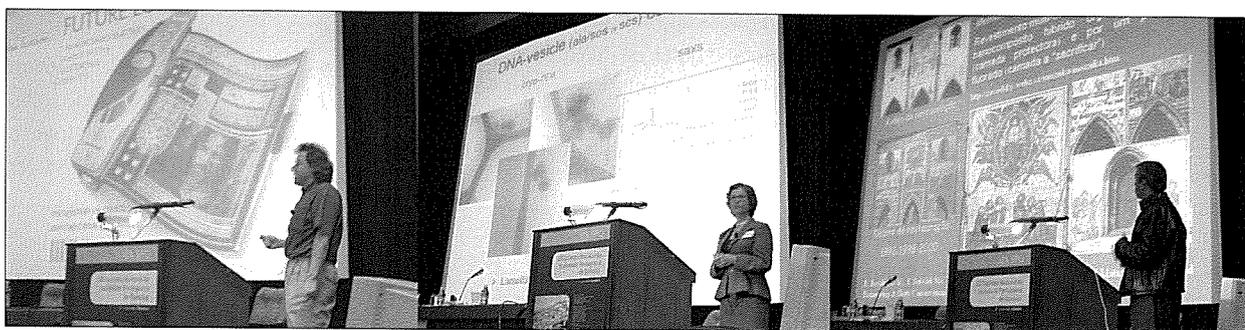
assim estava dimensionada e dirigida toda a organização.

Nesta edição, o XIX SPQ estava subordinado ao tema "Química Macromolecular" e incluiu no seu programa três importantes iniciativas a destacar: o lançamento do livro "Química de Polímeros", que teve a particularidade de ter sido organizado de acordo com a temática do encontro; uma exposição denominada "Apontamentos sobre a História do Laboratório Químico em Coimbra. Espectroscopia." (ver destaque no seguimento) e, por último, a sessão debate: "A Química tem Soluções?".

Mas vamos por partes, ilustrando o que foi o XIX SPQ. Após a sessão inaugural, iniciaram-se as conferências com a

Lição Plenária do Prof. Andy Monkman, que nos introduziu no fascinante mundo dos polímeros condutores – polímeros que constituem já uma realidade no nosso dia-a-dia – tendo dado como exemplo os telemóveis da próxima geração que foram recentemente capa da prestigiada "Scientific American" (apresentada pelo conferencista num dos seus slides) onde de um destes aparelhos sai impresso um jornal feito de polímeros condutores. Seguiu-se a lição plenária da Prof. Maria da Graça Miguel, sobre o tema das interações do ADN com surfactantes e anfífilicos, com especial ênfase no importante problema do "gene delivery". No final, fez questão de mencionar o recentemente criado Grupo de Colóides, Polímeros e Interfa-

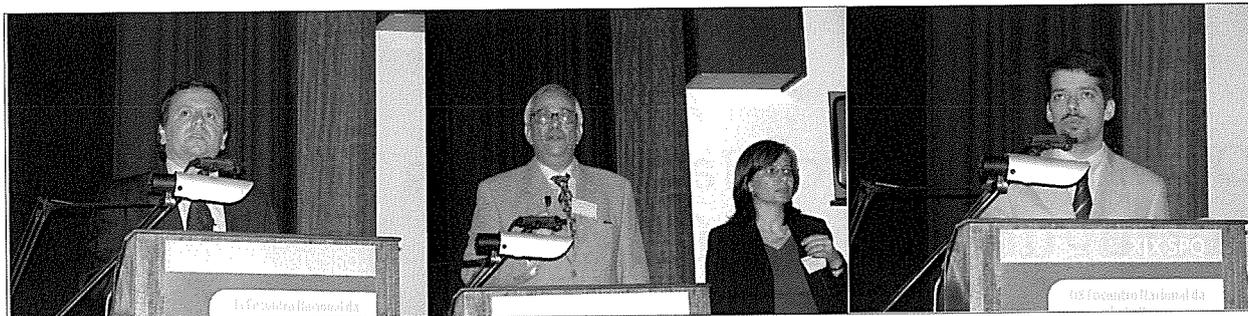
**figura 1** Da esquerda para a direita: o Prof. Andy Monkman (na parte final da sua comunicação, mostrando a capa da "Scientific American"); a Prof. Maria da Graça Miguel; e o Prof. Luís Carlos nas suas apresentações.



**figura 2** Da esquerda para a direita, os Professores Bengt Nordén, Christopher Brett, Laura Ilharco e Cristina Freire nas suas apresentações.



\* Presidente da Comissão Organizadora do XIX SPQ e da Delegação de Coimbra da SPQ



**figura 3** da esquerda para a direita, o Prof. Carlos Pascoal Neto, o Eng.º José Nogueira e a Eng.ª Susana Carvalho (apresentação conjunta) e o Eng.º João Letras no decorrer das suas apresentações.

ces dentro da SPQ. A terminar a manhã do primeiro dia foi a vez do Prof. Luís Carlos abordar, os avanços na área dos híbridos orgânicos/inorgânicos em particular no método de síntese inorgânica sol-gel.

As sessões da tarde iniciaram-se com a Lição Plenária do Prof. Bengt Nordén, na qual este abordou as interações específicas que se verificam entre complexos de ruténio e o ADN.

Os trabalhos continuaram com as comunicações convidadas dos Prof. Christopher Brett, Laura Ilharco e Cristina Freire, que abordaram os temas dos polímeros condutores como potenciais sensores electroquímicos, da química sol-gel e dos filmes de polímeros de Salen (envolvendo catiões metálicos como o Níquel), respectivamente.

Após um intervalo para café muito concorrido, com apresentação de painéis simultânea, iniciou-se a sessão final do primeiro dia, com o Dr. José Gamelas (diferentes geometrias e arquitecturas de polioxometalatos com aplicação no processo de branqueamento da pasta de papel) a que se seguiu a Dra Cecília Leal (interacção de surfactantes catiónicos com o ADN com relevo para o grau e extensão de hidratação existente nas estruturas que resultam deste tipo de interações), tendo esta sessão, presidida pelo Prof. João Rocha, terminado com o lançamento do livro "Química de Polí-

meros", uma obra de referência na área dos novos materiais, para os países de língua oficial portuguesa, segundo o texto de um dos revisores científicos da obra. O dia terminou com um agradável Porto de Honra, oferecido pela Câmara Municipal de Coimbra, na Casa de Portugal, junto ao rio Mondego.

O dia 16 de Abril iniciou-se com a Lição Plenária do Prof. Carlos Pascoal Neto, a que se seguiram as contribuições dos convidados da indústria: o Eng.º José Nogueira (CIN) e a Eng.ª Susana Carvalho (Resiquímica) que apresentaram uma comunicação conjunta sobre os constituintes das tintas e sua durabilidade; Eng.º João Letras da empresa Plastval, que abordou o tema da reciclagem.

A segunda parte da sessão da manhã de sexta-feira iniciou-se com a cerimónia de entrega do Prémio Ferreira da Silva ao Prof. José Cavaleiro e do Prémio Vicente Seabra ao Prof. Miguel Castanho. O secretário-geral da SPQ, Prof. Mário Nuno Berberan Santos, salientou que o prémio de carreira, entregue ao Prof. José Cavaleiro, era inédito na área da

Química Orgânica, bem como o carácter pioneiro do Prémio Vicente Seabra visando o reconhecimento do trabalho realizado por um jovem investigador.

Na Plenária Ferreira da Silva, o Prof. José Cavaleiro expôs o trabalho de cerca de duas décadas em sínteses e aplicações diversas de macrociclos tetrapirrólicos. Uma impressionante lição sobre as mais diversificadas estratégias de síntese e potenciais aplicações das porfirinas.

A sessão da tarde iniciou-se com a merecida homenagem ao Professor Manuel Alves da Silva, professor Jubilado da Universidade de Coimbra, por muitos considerado o pai da Química Polimérica em Portugal. O Professor Sebastião Formosinho fez o elogio da carreira e pessoa de Manuel Alves da Silva. Ainda dentro da sessão de Homenagem, o orador da Plenária Alves da Silva foi o Prof. Jim T. Guthrie.

A sessão da tarde continuou com uma tríade de comunicações orais seleccionadas (Professores António Maçanita, Moisés Canle e Luís Arnaut), que penso muitos dos presentes concordarão ter

**figura 4** Da esquerda para a direita, o Presidente da SPQ, Prof. José Manuel Gaspar Martinho, os premiados Miguel Castanho e José Cavaleiro (ao centro da fotografia) e o Secretário-Geral da SPQ, Prof. Mário Nuno Berberan Santos. (ao lado)

**figura 5** O homenageado, Professor Manuel Alves da Silva. (à direita)

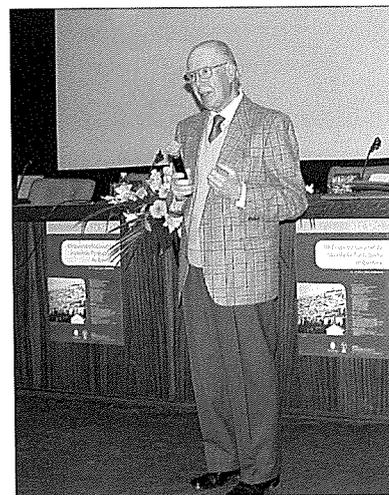




figura 6 Da esquerda para a direita, o Prof. António Maçanita, o Prof. Moisés Canle e o Prof. Luís Arnaut nas suas apresentações.



figura 7 Da esquerda para a direita o Prof. Rui Reis, o Dr. Ricardo Esteves de Castro e o Prof. Manuel Monte nas suas apresentações.

sido das mais bem conseguidas, muito também por culpa do Prof. Carlos Romão pela forma como moderou a sessão.

Após mais uma concorridíssima sessão de posters, foi a vez de se iniciar a última sessão do dia com o Prof. Rui Reis, líder do grupo 3B da Universidade do Minho, que na sua conferência nos con-

figura 8 Alguns dos organizadores e colaboradores do XIXSPQ em São Marcos (em cima) e os fadistas em plena actuação (em baixo).



duziu a mundos de aplicações biomédicas de polímeros, com uma ênfase especial na reconstrução óssea.

A sessão final deste dia terminou com as apresentações do Dr. Ricardo Esteves de Castro (estabilidade térmica de fármacos quando estudados pela técnica de DSC) e do Prof. Manuel Monte (estudos termodinâmicos de diferentes ácidos aquilbenzóicos).

O dia terminou com o Jantar do Encontro no Palácio de São Marcos. Foi uma oportunidade para apreciar um momento de elegância e requinte, e relaxar de mais um intenso dia de trabalhos. No final, houve oportunidade de assistir a uma memorável sessão de Fado pelo grupo "Canção de Coimbra".

O último dia do Encontro, iniciou-se com a Plenária do Prof. José Moura sobre as potencialidades do programa BIGGER desenvolvido para aplicações de modulação molecular com proteínas. Seguiu-se a apresentação da Dra. Maria Gabriela de Almeida que descreveu um potencial biossensor electroquímico para doseamento de nitritos.

A sessão prosseguiu com uma comunicação do Prof. Joaquim Faria que abordou o tema das aplicações fotocataliti-

cas de um catalisador misto de nanotubo de carbono-TiO<sub>2</sub>. Finalmente o Dr. Pedro Costa abordou também o tema dos nanotubos e da encapsulação de nanocristais. Muito se falará num futuro próximo destes nanotubos, no entanto foi o próprio Pedro Costa que referenciou como a melhor ilustração do impacto destes, o ter encontrado, no Corte Inglês, uma raquete de ténis reforçada com nanotubos de carbono.

O programa prosseguiu com o muito aguardado debate "A Química tem Soluções?". A mesa, moderada pelo Prof. Sebastião Formosinho, teve, no seu painel principal, os Prof. Júlio Pedrosa, Dra. Helena Martinho, Prof. José Manuel Gaspar Martinho, Prof. João Carlos Bordado e Prof. Fernando Pina. O debate foi extremamente vivo e mostrou que as preocupações que motivam muitos dos presentes vão claramente além do capital científico dos participantes, mesmo para os educadores presentes.

Antes de terminar, uma palavra para a excelente qualidade das sessões de posters. A sala esteve sempre muito concorrida e apesar das duas sessões diárias que lhes foram dedicadas (1 hora e 25 minutos no primeiro dia e 1 hora e 15 minutos no segundo), parece



**figura 9** O Prof. José Galhardas Moura (em cima à esquerda) na apresentação da sua Lição Plenária, a Dra. Maria Gabriela de Almeida (em cima à direita), o Prof. Joaquim L. Faria (em baixo à esquerda) e o Dr. Pedro Costa (em baixo à direita) nas suas apresentações

que o tempo não foi suficiente para quem queria discutir detalhadamente os seus trabalhos expostos. Os organizadores deixaram que a sala estivesse permanentemente aberta e foi frequente ver muitos a trocarem impressões mesmo durante a hora de almoço.

Antes do muito aguardado *cocktail*, teve lugar a sessão de encerramento. Após os agradecimentos a todos quantos estiveram envolvidos na organização e realização deste evento, foi a vez do ainda secretário-geral da SPQ (Prof. Mário Nuno Berberan Santos) relembrar a todos que a SPQ tem tentado ter uma acção dinamizadora na sociedade e em particular no ensino secundário, de que

é exemplo a carteira de conferências disponível no *site* da SPQ ([www.spq.pt](http://www.spq.pt)). Por fim, foi a vez do actual Presidente da SPQ (anterior vice-presidente), Prof. José Manuel Gaspar Martinho congratular-se com a adesão e bom acolhimento que este Encontro teve na cidade de Coimbra.

Os Patrocinadores e Expositores constituíram um importante elemento do XIX SPQ. A sua colaboração e adesão foram fundamentais para o bom sucesso deste evento. Espera-se que adiram a futuras iniciativas, pois a química é sempre vasta o suficiente para acolher mais parceiros (figura 11).

**figura 10** Alguns dos intervenientes na sessão de debate "A Química tem Soluções?". Da esquerda para a direita: Prof. Fernando Pina, Prof. João Carlos Bordado, Prof. J. M. Gaspar Martinho e Prof. Sebastião Formosinho. Não se encontram na figura a Dra. Helena Martinho e o Prof. Júlio Pedrosa.



Rapidamente todos fomos para os acespipes do *cocktail*. Apesar da hora já tardia havia ainda muita gente na sala. Foi o momento final do Encontro.

Para todos aqueles que aqui estiveram e gostaram do acolhimento relembro-lhes apenas que para o ano de 2005 caberá a Coimbra organizar o 8.º Encontro Nacional de Fotoquímica. A fotoquímica é a ciência da luz e adquire cada vez mais ênfase e força na química portuguesa. Se tiverem vontade de regressar, por certo encontrareis um tema que vos relacione com luz, radiação, fotobiologia, fotoquímica, etc.

A todos um até sempre!

#### figura 11

##### Patrocinadores

##### CIN

Emílio de Azevedo Campos S.A.  
Resiquímica  
Fundação Montepio Geral  
Neira & Nunes, Alimentar  
Emílio Azevedo Campos  
ILC  
Gravimeta

##### Delta Cafés

Câmara Municipal de Coimbra  
Governo Civil de Coimbra  
Faculdade de Ciências e Tecnologia da  
Universidade de Coimbra  
Departamento de Química da Universidade de  
Coimbra  
Reitoria da Universidade de Coimbra  
Fundação para a Ciência e a Tecnologia  
Jobin Yvon- Horiba

##### Bióptica

BPI, Banco Patrocinador do Encontro  
**Expositores**  
Dias de Sousa  
Rotoquímica  
Soquímica  
Fundação Calouste Gulbenkian  
Reagente 5  
José Manuel Gomes dos Santos  
Prata e Rodrigues



# Apontamentos da história do Laboratório Químico da Universidade de Coimbra. A evolução da espectroscopia

M. ERMELINDA S. EUSÉBIO, M. LUÍSA P. LEITÃO, J. SIMÕES REDINHA\*

## Razões para a escolha do tema

Integrada no programa do XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, que teve lugar em Coimbra de 15 a 17 de Abril de 2004, realizou-se uma exposição sobre aspectos da vida do Departamento de Química da Universidade de Coimbra com enfoque na evolução da espectroscopia. A contemporaneidade do começo do estudo das ciências experimentais na Universidade Portuguesa, então em Coimbra, e a publicação dos primeiros resultados de investigação de Lavoisier que iriam levar ao estabelecimento das bases científicas da química, torna a história da química em Coimbra em documento que permite acompanhar a evolução desta ciência em Portugal e registar os seus passos mais significativos desde o nascimento até à actualidade.

Para a ocasião não se podia ir além de apontamentos sobre uma dada época da história, sobre o desenvolvimento de um dos ramos de especialização em que a disciplina se foi desdobrando no decorrer do século XIX ou, ainda, sobre os progressos duma técnica de investigação que tivesse tido um papel relevante ao longo dos tempos. Optámos pela terceira alternativa escolhendo a

espectroscopia como o tema principal da exposição. É um método que deu uma contribuição relevante para o avanço teórico da física e da química e que desde o seu aparecimento fez parte das técnicas mais utilizadas pela química aplicada. Por estas razões e porque a espectroscopia é hoje usada em qualquer laboratório de investigação, de controle analítico ou de ensino, é matéria que não pode deixar de prender a atenção de todos os químicos. À maneira de introdução incluíram-se na exposição alguns documentos dos laboratórios e da actividade científica dos primeiros tempos da vida da química em Portugal.

A atenção que o Departamento de Química da Universidade de Coimbra sempre prestou à espectroscopia deixou-lhe testemunhos que permitem recriar as épocas marcantes da história desta técnica e que a exposição procurou mostrar.

## O nascimento da Química em Portugal

A reforma imposta à Universidade pelo Marquês de Pombal em 1772 pôs termo à crise que se instalara nesta instituição desde meados do século XVI. Quando em todas as universidades europeias

desde há muito que o método científico moderno se encontrava enraizado, em Portugal pontificava ainda a escolástica do século XII. O andar do tempo e o avanço da ciência transformaram a Universidade num organismo caduco onde reinava a indisciplina.

Às Faculdades de Teologia, Cânones, Leis e Medicina já existentes, a nova reforma veio juntar duas outras especialmente destinadas ao estudo da ciência, a Faculdade de Matemática e a Faculdade de Filosofia. As faculdades foram organizadas em disciplinas que reflectiam o panorama científico e cultural da época. Um novo método científico baseado na experiência observada e interrogada veio substituir uma dialéctica estéril apoiada na lógica Aristotélica, tendo como base os dogmas do Cristianismo. Pelo estado em que se encontrava a Universidade e a actualização que a reforma lhe imprimiu, esta foi verdadeiramente um renascer da instituição.

O curso filosófico tinha a duração de quatro anos, o último dos quais era dedicado ao estudo da química. Os estatutos dão uma definição desta ciência que está em consonância com a classificação dos conhecimentos do Século das Luzes e com uma visão Baconiana do

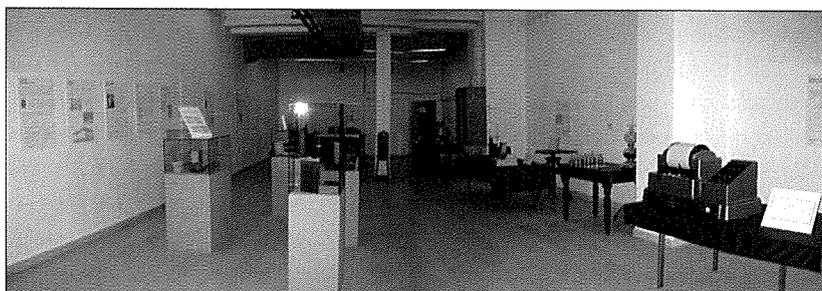


figura 1 Uma vista da exposição.

\* Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 3004-535 Coimbra

CURSO FILOSÓFICO	
1º Ano	Filosofia Racional e Moral
2º Ano	História Natural Geometria (Fac. Matemática)
3º Ano	Física Experimental
4º Ano	Chymica

figura 2 Curso filosófico 1772

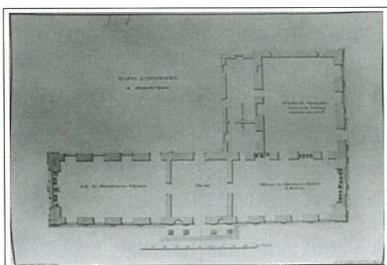


figura 3 Planta de Laboratório Chymyco

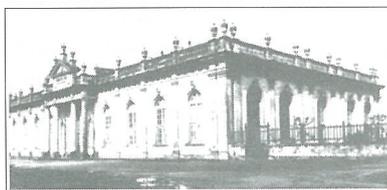


figura 4 Laboratório Chymico

papel da ciência. "Sendo a Chymica huma parte da Física Pratica, que serve não somente para demonstrar por via de Experiencias particulares as Propriedades dos Corpos, mas também para produzir, pela mistura de diferentes substancias Novos compostos de grande uso nas Artes..." Com a visão, o esclarecimento e o pormenor com que planeava toda a sua obra e a determinação que punha na sua execução, o Marquês de Pombal dedicou atenção particular à criação de condições necessárias ao trabalho experimental, ou não fosse a experimentação a base do método de aquisição de conhecimentos que se pretendia implantar. Adaptaram-se alguns dos edificios às novas exigências do ensino e construíram-se outros de raiz. As obras, levadas a cabo entre 1773 e 1777, ascenderam a duzentos e doze milhões, duzentos e dezassete mil réis e exigiram o apoio dum estaleiro de cons-



figura 5 Manufatura de utensílios de laboratório em barro.

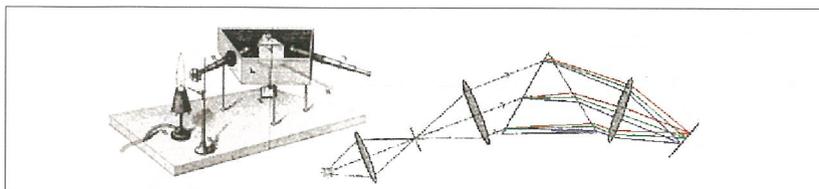
Depreza na manufactura da louça p. <sup>a</sup> este Laboratorio.	
O Mestre Oleiro, João Francisco Cardoso, vendeo dize dias (os primeiros seis dias tiverão principio em 30 de Junho proximo preterito até 4 de corrente mes d'Agosto; e os outros seis em 4 dias seis até hoje ante do mes) a preço de 600 réis, das No. 177 200	
Dois trabalhadores em hum Trabalhador, qua uniassem o barro, vendeo hum dia a preço de 300 <sup>rs</sup>	\$ 300
	\$ 160
Compram-se	
Hum Carrada de barro amarello p. <sup>a</sup> a louça da Officina, vindo da quinta de Calhabe, por preço de	\$ 120
Dois Carradas de barro branco, vindo de Burengo, preço e carreto a 160 <sup>rs</sup> cada Carrada, das	240
Quatro centos de Fajias p. <sup>a</sup> a desmancha	\$ 189 20
Para a louça da Officina	
Tres carradas de Saibro, vindo de Lousas, seu custo, e condução em barco e em carros,	3860
Dois trabalhadores, de conduzir em barro e saibro preparados p. <sup>a</sup> a Officina do Oleiro, vendeo hum dia a preço de 100 <sup>rs</sup>	\$ 20

trução de significativas dimensões e a construção de uma fábrica de telha para o fornecimento da telha, tijolo e azulejos para as novas edificações. Vieram na altura para Coimbra grande número de operários e técnicos especializados. O autor da maioria dos projectos foi o engenheiro e arquitecto inglês tenente coronel Guilherme Elsdon, que residia em Lisboa há alguns anos e fora convidado pelo Marquês para director das obras da Universidade de Coimbra.

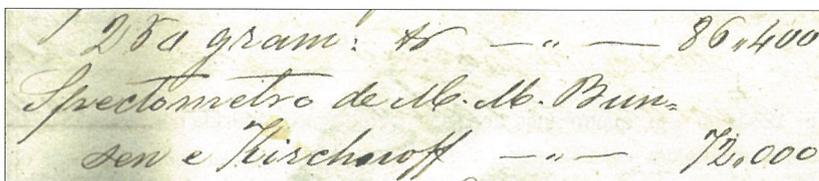
Para os trabalhos de química foi construído o Laboratorio Chymico, edificio de um único piso com uma área coberta de 12 400 m<sup>2</sup> compreendendo um amplo átrio de entrada, três salas muito espaçosas e dois gabinetes. Das três salas, uma destinava-se a demonstrações de química, outra à realização de trabalhos laboratoriais relacionados com a medicina e a terceira a trabalhos em maior escala.

Segundo carta do Marquês para o Reitor, teria servido de base à planificação do Laboratorio a planta que o próprio Marquês mandara vir da corte de Viena de Áustria pelo conhecimento que tinha que "o paiz da Alemanha he aquelle em que a referida arte tem chegado ao grão de mayor perfeição".

Com fachada de linhas neoclássicas o edificio apresenta imponência, sobriedade e beleza. O Marquês quis conferir-lhe, como aliás a todas as edificações universitárias, uma dignidade exterior, o que se estava de acordo com o valor científico e o impacto social e económico da reforma, o distinguia dos demais laboratórios europeus de química. Na verdade, naquela altura os trabalhos de química eram efectuados em instalações improvisadas e só a partir de começos do século XIX é que começaram a surgir laboratórios para o ensino e in-



**figura 6** A radiação produzida na chama do bico inventado por Bunsen entra no colimador através de uma fenda e é convertida num feixe de raios paralelos que é decomposto no prisma e o espectro resultante observado num óculo.



**figura 7** Registo da compra de um espectróscopo a Bunsen e Kirchhoff, em Agosto de 1864.

investigação planeados de raíz. O Laboratório Químico, com as adaptações e acrescentos que foram sendo feitos, serviu de sede à química da Universidade de Coimbra desde 1775, data em que passou a ser utilizado, até 1975, ou seja, durante precisamente dois séculos.

Se o ano de 1772 ficou célebre na história portuguesa, ele ficou memorável na história universal por ter marcado o início das investigações de Lavoisier que deram origem à revolução que se operou nesta ciência. Quer dizer que a química portuguesa tem o berço nas raízes da química moderna.

Os petrechos de laboratório na fase inicial da sua actividade eram os necessários para demonstrar os fenómenos da química da época, realizar experiências relacionadas com a medicina e a farmácia e para a execução da análise de águas minerais e produtos naturais como quinas provenientes das colónias. A preparação de materiais de interesse prático como o fabrico da pólvora mereceram alguma atenção chegando-se a construir uma nitreira, e desde cedo se abandonou a intenção inicial da preparação de substâncias em larga escala, como a da água forte e do sublimado, por se não terem conseguido contratos para a sua comercialização.

Decomposição de vapor de água pelo ferro ao rubro, manipulação e estudo das propriedades dos gases, papel do oxigénio na respiração, determinação da riqueza alcoólica de bebidas e da acidez de vinagre, operações de destilação e evaporação, fusão de minerais, faziam parte dos trabalhos de ensino laboratorial. O carvão era o combustível usado para aquecimento.

Não houve grandes inovações no equipamento laboratorial que vinha sendo usado, algum dele desde há longa data. O avanço que as técnicas laboratoriais haviam alcançado era suficiente para as necessidades do desenvolvimento teórico. Nem mesmo a revolução de Lavoisier se ficou a dever à invenção de novos aparelhos ou até à novidade das experiências, mas sim ao seu génio de investigador, ao planeamento e rigor de execução do trabalho que realizou.

Ajuda a formar uma imagem dos laboratórios da época a alusão ao fabrico de utensílios de laboratório em barro, no próprio estabelecimento que dispunha de um forno para cozedura e contratava ocasionalmente um mestre oleiro e ajudantes para proceder à preparação das peças pretendidas: fogões, retortas, cápsulas, cadinhos, etc.

É digno de registo neste período inicial da vida da química a publicação por Vi-

cente Coelho da Silva de Seabra e Telles, na altura estudante de graduação da Faculdade de Filosofia, mais tarde demonstrador de química e metalurgia e lente substituto desta Faculdade, do livro de texto “Elementos de Chimica”. O livro consta de duas partes, a primeira, Chimica Theorica, foi escrita em 1788, um ano antes da publicação do “Traité de Chimie” e a segunda, Chimica Theorica e Practica, em 1790. O que tornou histórico este livro foi o facto de ser o primeiro livro português escrito na linguagem da nova química, numa altura em que esta experimentava fortes dificuldades em vencer o flogisto, fortemente enraizado por toda a Europa. Na verdade, se logo em 1786 Guyton de Morveau, Fourcroy e Berthollet, apoiaram a teoria do seu compatriota, tornando-se seus colaboradores e divulgadores, outrotanto não aconteceu com grande número de químicos. Figuras influentes como o inglês Kirwan e o alemão Klappert só se renderiam seis anos depois e houve alguns, como Cavendish e Priestley, que se mantiveram fiéis à teoria do flogisto até à morte, que ocorreu já no início do século XIX.

Atento à evolução da ciência, Seabra merece ser incluído nos primeiros aderentes às ideias da química moderna.

**figura 8** Equipamento para obtenção de espectros de absorção molecular no ultravioleta.

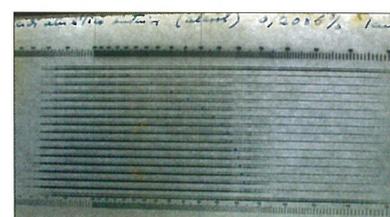
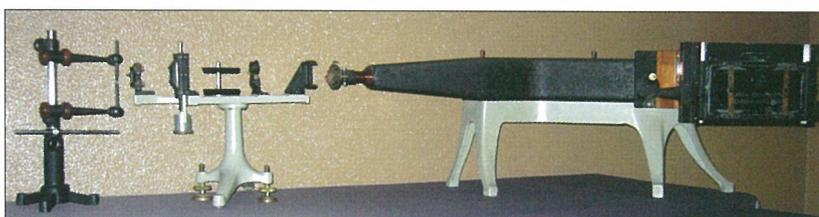
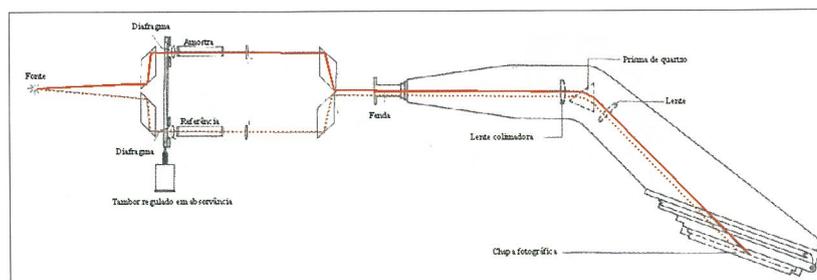


figura 9 Percurso óptico na aparelhagem Spekker-Hilger para obtenção de espectros de absorção no ultravioleta.



## A invenção do primeiro espectroscópio

O primeiro trabalho da utilização de espectros como método analítico é da autoria de Robert Wilhelm Bunsen e Gustav Robert Kirchhoff. Este trabalho foi comunicado à Academia de Berlim em 1859 e publicado em 1860. Bunsen, dos poucos químicos que nos meados do século XIX se interessavam pela física, nutria paixão pelos aspectos práticos da ciência; Kirchhoff, físico, dedicava-se particularmente ao estudo da corrente eléctrica. Amigos pessoais e ambos professores na Universidade de Heidelberg, colaboraram no estudo dos espectros originados por sais quando introduzidos na chama. A motivação do primeiro era a interpretação da cor dada à chama por diversos sais, fenómeno já conhecido (Talbot e Herschel, 1826, Herschel, 1832); a do segundo era a interpretação das riscas de Fraunhofer (1814) do espectro solar. Para realização do projecto construíram o primeiro espectroscópio.

Os dois investigadores chegaram à conclusão que os elementos têm espectros característicos e que a localização no espectro da absorção da luz é exactamente a mesma da sua emissão. Com o novo espectroscópio descobriram o rubídio e o cézio. Todavia, a sua contribuição mais valiosa para a ciência foi o novo método de análise que lhe legaram.

Em 1864, ou seja, quatro anos depois do seu invento era registada pelo Laboratório Químico a aquisição de um espectroscópio de Bunsen e Kirchhoff. Com ele se iniciava o estudo da espectroscopia, uma das técnicas que maior atenção recebeu da Química de Coimbra e que teve um papel importante na sua actividade científica.

## Espectrofotometria de absorção molecular nas regiões ultravioleta e visível. Espectrógrafo de registo fotográfico

Em 1935 foi instalado no Laboratório Químico da Universidade de Coimbra um gabinete de espectrofotometria equipado com os seguintes instrumentos: i) espectrógrafo de prisma de quartzo de dispersão média e registo fotográfico para estudos no ultravioleta, Adam Hilger E316, ii) fotómetro Spekker, iii) espectrógrafo para estudos na região visível, Hilger-Nutting, iv) microfotómetro fotoeléctrico.

Este equipamento tornava possível a obtenção de espectros de absorção molecular na região visível e ultravioleta, dados que já na altura mostravam grande potencialidade na identificação e na determinação da estrutura de compostos.

O esquema da figura 9 ilustra o método de obtenção dum espectro de absorção no ultravioleta:

A radiação produzida por descarga eléctrica entre dois eléctrodos metálicos ou proveniente de uma lâmpada de hidrogénio originava no fotómetro dois feixes de igual potência luminosa, um atravessava a amostra e o outro o solvente ou o branco. A radiação transmitida era colimada e dava entrada no espectrógrafo originando dois espectros adjacentes, um da amostra e o outro do solvente, os quais eram registados numa película montada em celulóide ou em chapa de vidro. A potência do feixe que atravessava o solvente podia ser controlada por meio de um diafragma comandado por um tambor regulado em unidades de absorvância. O espectro de absorção era obtido a partir de uma série de espectros duplos, com diferentes valores de potência do feixe que passava pelo solvente, sendo a absorvância e o comprimento de onda dados pela linha que no solvente e na amostra tem igual intensidade. Uma comparação mais rigorosa de densidade de enegrecimento das linhas implicava o uso do microfotómetro.

Os espectros de absorção na região do visível eram obtidos de maneira semelhante, utilizando o espectrógrafo Hilger-Nutting de prisma de vidro.

figura 10 Equipamento para obtenção de espectros de emissão atómica em ultravioleta.



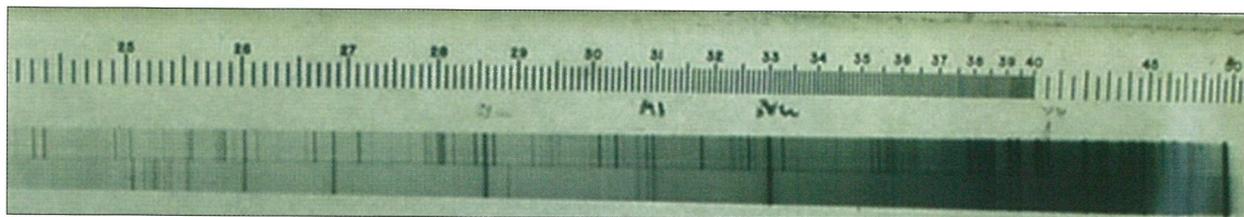


figura 11 Espectro do resíduo de uma água e de padrões em matriz de dióxido de estanho.

### Espectrografia de emissão por excitação em arco eléctrico

O espectrógrafo de absorção molecular era também usado para obtenção de espectros de emissão atômica, bastando para tanto, substituir o fotómetro por um arco eléctrico que servia de fonte de excitação.

A amostra era colocada numa cavidade de alguns milímetros de profundidade, aberta na extremidade do eléctrodo inferior. Como eléctrodos usavam-se frequentemente varas de grafite. Estabelecido o arco eléctrico, a temperatura era suficiente para produzir a vaporização e dissociação de praticamente todos os compostos inorgânicos e a excitação dos átomos da maioria dos elementos. A radiação emitida era focada sobre a fenda do espectrógrafo, originando o espectro que era gravado na chapa fotográfica.

O método podia ser utilizado para a identificação de metais em materiais sólidos, o que era feito com base no comprimento de onda das riscas de emissão. A quantificação tinha como base a medida da intensidade das riscas por meio de um densitómetro. O limite de detecção situava-se entre 0,1 e 0,0001%, dependendo da natureza do elemento. A precisão da quantificação era fraca, em virtude do registo do es-

pectro ser feito em película fotográfica, devendo o método ser considerado como muito sensível e apenas semi-quantitativo.

Além das universidades, esta técnica foi muito utilizada no controle analítico em laboratórios ligados às indústrias metalúrgica, cerâmica, extracção mineira, entre outras. A procura que teve levou várias firmas a construir espectrógrafos de dispersão óptica elevada, exclusivamente destinados à análise por excitação em arco de corrente contínua ou alternada, cuja produção se manteve até ao aparecimento da absorção atômica.

### Absorção molecular no ultravioleta. Espectrofotómetro de detecção fotoeléctrica

A construção de espectrofotómetros de operação mais simples e que dessem resultados mais rigorosos sob o ponto de vista quantitativo era uma necessidade que se fazia sentir. A determinação de compostos para os quais a radiação produzida pelo arco eléctrico não era aconselhável, como é o caso de vitaminas, constituía por altura de 1940 um problema que pressionava as firmas a desenvolver esforços nesse sentido. Iria ser a National Technical Laboratories, mais tarde Beckman Instruments Co, a ganhar a corrida.

Arnold O. Beckman era professor de química num instituto tecnológico da Califórnia e em 1935 abandonou o ensino para se dedicar à concepção de aparelhagem científica e à sua comercialização. Após o êxito que teve com o lançamento de famoso medidor de pH Beckman G, iniciou o fabrico de espectrofotómetros e em 21 de Julho de 1941 apresentava na Ninth Summer Conference on Spectroscopy, no Massachusetts Institute of Technology, o modelo DU que ia marcar uma era na história da espectroscopia. Nesse mesmo ano H. Cary e A. O. Beckman publicaram em J. Opt. Soc. Am. um artigo sobre o aparelho: "A quartz photoelectric spectrophotometer". Este modelo só deixou de ser fabricado em 1975 e durante os trinta e cinco anos de produção a firma vendeu 35000 instrumentos destinados a uma grande diversidade de laboratórios de química, de bioquímica e de controle laboratorial. A ele se ficaram a dever grandes avanços em bioquímica.

O espectrofotómetro Beckman era um instrumento de feixe único, com prisma de quartzo e montagem óptica do tipo Littrow. A detecção de radiação era feita por um fototubo e posteriormente por um fotomultiplicador. Como fontes de radiação usava uma lâmpada de incandescência de filamento de tungsténio para a região visível e para o ultravioleta

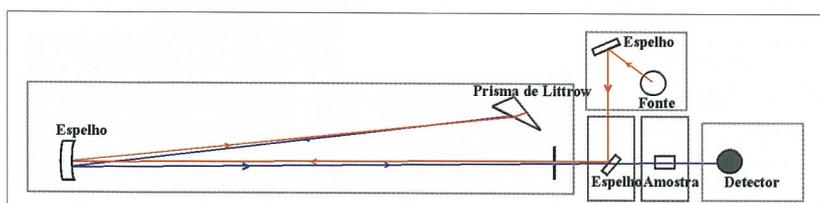


figura 12 Espectrofotómetro Beckman DU.

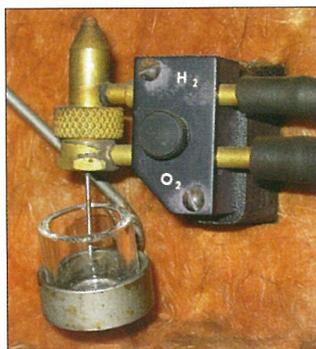


figura 14 Espectrofotómetro Beckman DU com acessório de chama.

uma lâmpada de descarga em hidrogénio que fora aperfeiçoada pela firma. As leituras eram feitas ponto a ponto e o espectro traçado manualmente em gráfico.

Os componentes ópticos e eléctricos estavam instalados na mesma caixa e a concepção modular dada ao aparelho tornava simples a substituição da fonte luminosa e o acoplamento dos vários acessórios que foram sendo fabricados no decurso das décadas de 40 e 50.

Nos finais da década de 1940 o equipamento de espectroscopia do Laboratório Químico foi modernizado com a aquisição de um espectrofotómetro DU seguida de acessórios de reflectância difusa, fluorescência total, fluorescência espectral e emissão em chama, à medida que foram sendo lançados no mercado. Este equipamento foi muito utilizado pelos diferentes grupos de investigação e teve um papel importante na actividade científica do Laboratório.

#### Emissão atómica.

##### Espectrofotómetro DU com acessório de chama

A firma Beckman fabricou em 1951 um dispositivo de obtenção de espectros de

emissão adaptado ao espectrofotómetro DU.

O queimador fabricado pela Beckman constava de duas câmaras concêntricas, uma para a condução de oxigénio e a outra para a de hidrogénio; no eixo destas câmaras ficava o tubo para a condução do líquido. Os dois gases sob pressão e o líquido a examinar, aspirado numa pequena cuvete e disperso em nevoeiro, eram misturados na chama que funcionava em regime turbulento emitindo um intenso silvo agudo. A temperatura da chama, da ordem de grandeza de 2000°C, só permitia excitar um número relativamente pequeno de metais. Todavia, era um método analítico rápido e com elevada sensibilidade para elementos que eram dificilmente determináveis pelos métodos clássicos, como era o caso do sódio e do potássio.

A invenção de queimadores capazes de introduzir na chama quantidades de solução bem definidas por regulação da pressão dos gases esteve na base do avanço desta técnica.

O equipamento de emissão atómica usado no Laboratório Químico em investigação e trabalhos analíticos era o Beckman DU com acessório de chama. Nos

laboratórios de ensino utilizava-se um fotómetro de chama alimentado por gás butano e ar comprimido, com detecção fotoelétrica e selecção de região espectral por intermédio de filtros, que era usado principalmente para determinação de sódio, potássio e cálcio.

#### Espectrofotometria de absorção molecular. Espectrofotómetros de registo contínuo

O passo mais importante da espectrofotometria de absorção molecular por transição electrónica a seguir à época do Beckman DU foi dado na direcção do fabrico de instrumentos de registo automático. Na verdade, um espectro traçado com a recolha de leituras ponto a ponto levava várias horas de trabalho intenso. Um dos primeiros espectrofotómetros de registo contínuo de espectro que apareceram no mercado foi o Cary modelo 14. Howard Cary pertenceu ao grupo Beckman onde tinha sido responsável pelo projecto que levou ao fabrico do DU. Abandonou esta firma para criar a Applied Physics Corporation que, posteriormente, passou a chamar-se Varian, tendo lançado em 1954 o espectrofotómetro Cary 14.

figura 15 Modelo primitivo do espectrofotómetro Cary 14.

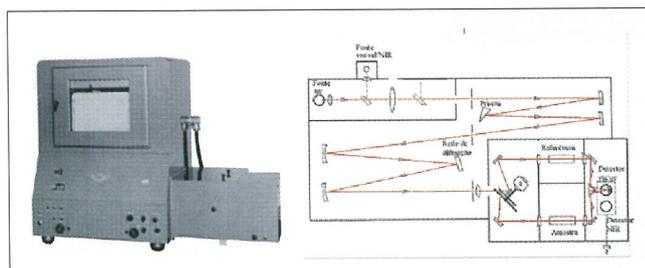


figura 16 Espectrofotómetro Cary 14 após a actualização.



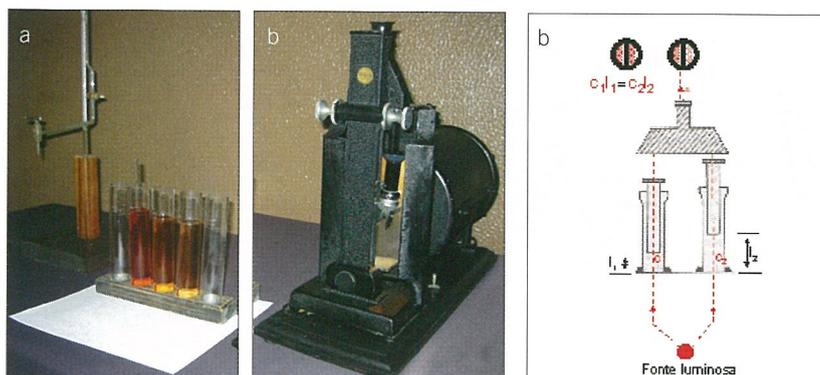


figura 17 Instrumentos de comparação colorimétrica: a) Provetas de Nessler; b) Colorímetro de Duboscq.

O Cary 14 é um aparelho de feixe duplo, com dois monocromadores e apresenta características que o tornaram uma referência no desenvolvimento da espectroscopia. Além do registo contínuo do espectro, largura de banda estreita, a região espectral fora alargada no ultravioleta e estendida até ao infravermelho próximo. Foi o espectrofotómetro com maior sucesso no estudo da absorção no infravermelho próximo, tornando possível a recolha de informações úteis sob o ponto de vista analítico através de harmónicos e bandas de combinação de bandas vibracionais fundamentais para a água e muitos compostos orgânicos.

A atenção dedicada pelo Laboratório Químico à evolução da espectrofotometria, levou à aquisição de um espectrofotómetro Cary 14 no início da década de 1960.

A evolução dos espectrofotómetros foi acompanhando os avanços da tecnologia. No que respeita à óptica é de assinalar a utilização das redes holográficas de difracção; no tocante à electrónica, as válvulas foram substituídas por transistores cada vez de menores dimensões, seguindo a previsão de Moore, em 1965. A dimensão dos instrumentos foi

sendo cada vez mais reduzida e as suas potencialidades de funcionamento foram aumentando. Os sinais analógicos foram convertidos em digitais e o registo em papel desapareceu.

O avanço da tecnologia dos computadores, cada vez de menores dimensões, com maior eficiência e preço mais baixo, levaram à sua introdução no controle das funções básicas do espectrofotómetro. Estes avanços, que tornaram possível a obtenção dum espectro em menos de um minuto, verificaram-se mais na electrónica e não no percurso óptico. É testemunho disto a reconversão do Cary 14 feita pela firma americana OLIS.inc. Aproveitando a excelência da parte óptica a firma encarrega-se da actualização da parte electrónica. Esta actualização foi recentemente efectuada no espectrofotómetro adquirido pelo Laboratório Químico.

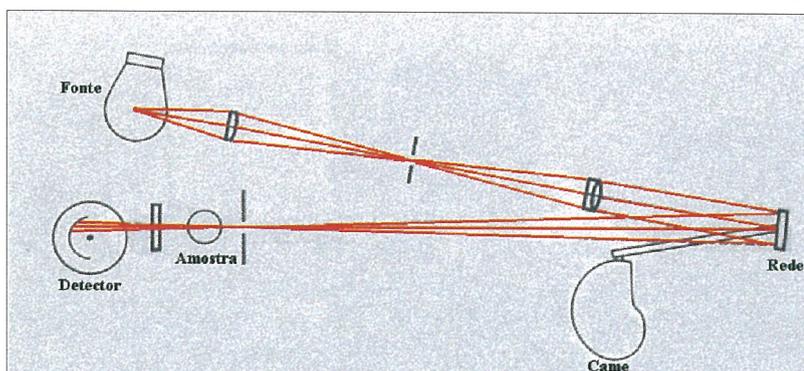
### Contribuição para a vulgarização da espectrofotometria de absorção. O aparecimento do Spectronic 20

A determinação por comparação da intensidade de cor da amostra e de padrões é um método analítico que re-

monta a meados do século XIX com o uso de provetas de Nessler e de Hehner. Além do uso de provetas de vidro, a comparação visual era feita em colorímetros, dentre os quais ficou registado na história o colorímetro de Duboscq (1870), no qual a igualdade de intensidade de cor da solução e do padrão era feita fazendo variar a espessura das soluções. No início do século XIX a determinação de pH, que já na altura se revestia de grande importância para a interpretação de reacções bioquímicas e da actividade enzimática, era efectuada por comparação da cor dada pelas soluções a indicadores com a de soluções padrão.

Mais recentemente a colorimetria adquiriu grande popularidade com a descoberta de complexantes que originam com os iões a determinar compostos corados. Os instrumentos usados passaram a ser colorímetros de detecção fotoelétrica e depois espectrofotómetros. Os primeiros não tinham selectividade satisfatória para em muitos sistemas discriminar a cor da amostra da de interferentes a não ser através de uma colecção dispendiosa de filtros e os segundos eram instrumentos dispendiosos. É neste contexto que surgiu o Spectronic 20.

figura 18 Espectrofotómetro Spectronic 20.



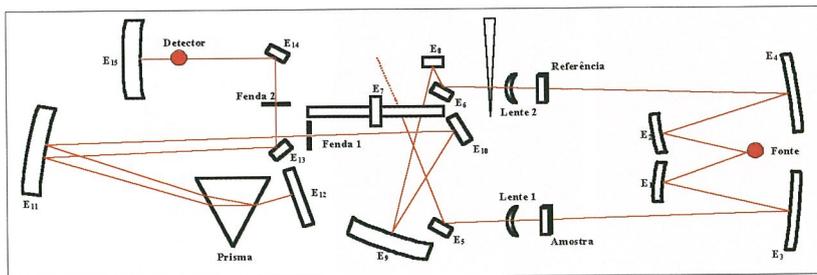
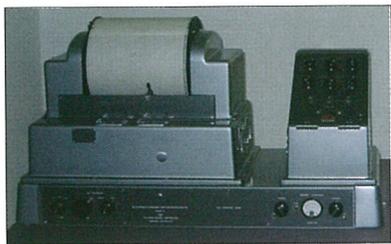


figura 19 Espectrofotômetro de infravermelho Perkin-Elmer 21.

O Spectronic 20 era um espectrofotômetro fabricado pela Bausch and Lomb para a região do visível, que apareceu no mercado em 1954. Era um espectrofotômetro com uma largura de banda de 20 nm e de preço módico comparado aos existentes então no mercado. O seu preço acessível deu-lhe grande divulgação nos laboratórios de ensino, de controle analítico de química, de bioquímica, de impacto ambiental e pôs termo ao fabrico de colorímetros.

### Espectrofotometria de absorção no infravermelho

Estudos realizados em laboratórios universitários de física mostraram o valor da espectrofotometria na região do infravermelho na química orgânica. Por esta razão, nos finais dos anos 1930 várias firmas estavam empenhadas na construção de aparelhos de infravermelho. A eclosão da 2ª guerra mundial veio evidenciar a necessidade destes instrumentos. Em 1941 o governo britânico pedia a determinação de hidrocarbonetos presentes na gasolina usada pelo inimigo; a ocupação pelos japoneses de regiões produtoras de borracha natural levou os Estados Unidos a desenvolver a produção de borracha sintética, tornando-se necessário o controle de butadie-

no nos produtos da indústria petroquímica. A resposta a estes e naturalmente outros problemas podia ser dada convenientemente pela espectrofotometria de infravermelho. A pressão exercida pela necessidade foi sempre uma forte força impulsionadora do progresso e alguns espectrofotômetros foram sendo construídos. Todavia, a complexidade de funcionamento só era acessível a espectroscopistas treinados e não ao químico comum. O primeiro instrumento que teve grande sucesso foi o modelo 21 da Perkin-Elmer, apresentado no encontro de 1950 da Optical Society of America, em Detroit.

O Perkin-Elmer 21 era um espectrofotômetro de feixe duplo – o primeiro instrumento deste tipo – com prisma de cloreto de sódio, apresentava elevada resolução, boa reproducibilidade e era de fácil utilização. O prisma e toda a parte óptica exigiam grandes cuidados de manutenção.

A aquisição de um espectrofotômetro deste modelo pelo Laboratório Químico teve lugar no final dos anos 1950.

A competição entre firmas construtoras de espectrofotômetros no período que se segue ao aparecimento do Perkin-

Elmer 21 tinha por principal objectivo o aumento da resolução.

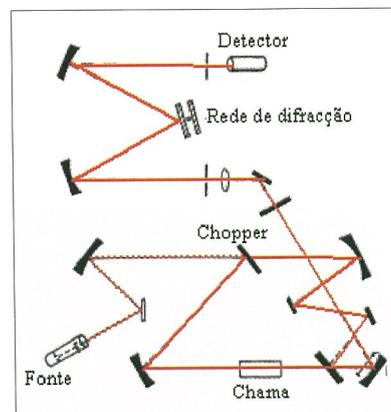
A partir de meados de 1970 verificaram-se avanços significativos na espectrofotometria de infravermelho resultantes da introdução do computador e aplicação das técnicas de transformadas de Fourier. Estas inovações permitiram a acumulação sucessiva de espectros e registo de todo o espectro em simultâneo, o que veio aumentar a sensibilidade e a potencialidade de acoplamento dos espectrofotômetros de infravermelho a outro tipo de instrumentos como cromatógrafos gás/líquido, por exemplo.

Os instrumentos dispersivos a partir do início da década de 1980 foram sendo substituídos por espectrofotômetros de transformadas de Fourier.

### Espectrofotometria de absorção atômica

A emissão atômica dera uma contribuição importante para a análise inorgânica, mas o número de elementos que podiam ser determinados por esta técnica era relativamente pequeno. Era a bem dizer uma técnica complementar dos métodos convencionais de análise química. Alan Walsh descreve como em 1952 se interrogava sobre os motivos

figura 20 Espectrofotômetro de absorção atômica, modelo Perkin-Elmer 403.



que levaram ao desenvolvimento de espectrofotómetros de absorção para as moléculas e de espectrofotómetros de emissão para os átomos, e não havia ainda sido inventado um método de absorção atómica, quando este tinha vantagens sobre a emissão: a temperatura requerida é somente a necessária para a produção do vapor atómico e não depende do valor da energia de excitação do átomo; a possibilidade de evitar interferências de excitação, que se verificavam em emissão.

Como resultado de investigação independente Walsh e Alkemade publicaram em 1954 os princípios básicos do método de absorção atómica. O trabalho do primeiro autor foi enviado para Spectrochemical Analysis em 27 de Dezembro de 1954 e o do segundo em 29 de Dezembro do mesmo ano para Applied Science Research. A comercialização do

primeiro instrumento verificou-se em 1962 e veio marcar o início duma procura sem paralelo na história da química analítica. No final da década calcula-se em mais de 10000 o número de instrumentos instalados e por 1977 o número cresceu para 40000, distribuídos por uma grande diversidade de laboratórios.

São de registar os avanços da técnica devidos à invenção de vários dispositivos de atomização que vieram juntar-se ao da chama: câmara de grafite (1958 e 1968), câmara de vapor frio (1967), câmara de hidretos (1973).

O equipamento de absorção atómica adquirido pelo Laboratório Químico em 1968 foi um espectrofotómetro modelo 403 da Perkin-Elmer, idêntico ao modelo 303, o primeiro instrumento de absorção atómica comercializado.

A instrumentação nos domínios de espectroscopia incluídos na exposição foi sendo actualizada ao mesmo tempo que foi sendo adquirido equipamento de espectroscopia necessário para a actividade científica nas áreas de ressonância magnética nuclear, espectroscopia Raman e fotoquímica.

A iniciativa da realização desta exposição cabe à Comissão Organizadora do XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, a quem desejamos agradecer o interesse que dedicou à sua organização. Pela ajuda que nos prestaram na preparação dos painéis, queremos expressar o nosso reconhecimento à Doutora Teresa Margarida Roseiro Maria Estronca, ao Mestre Ricardo António Esteves de Castro e à Licenciada Luciana Isabel Nabais Tomé.



### **Equipamento de Laboratório**

Balanças - Centrifugas - Aparelhos de pH - Tituladores  
Conduímetros - Agitadores - Espectrofotómetros  
Microscópios - etc.

### **Vidros e Plásticos de Laboratório**

Distribuidores NORMAX

### **Material Didáctico**

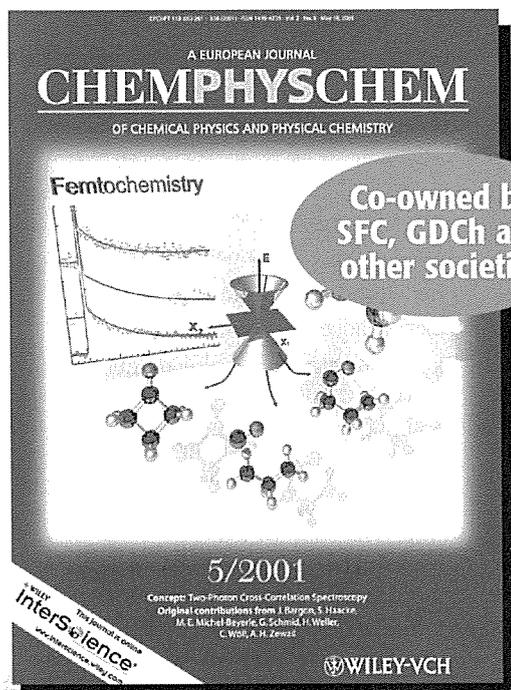
Ensino Secundário e Superior

Representantes exclusivos SISTEDUC - Sistemas Educativos S.A.

Rua Soeiro Pereira Gomes, 15 r/c Frente  
Bom Sucesso - 2615 Alverca

Telefs. (01) 957 04 20/1/2 - Fax (351-1-957 04 23) - Portugal

# Subscribe Now!



## ChemPhysChem – Where Chemistry Meets Physics Meets Chemistry...

ChemPhysChem amalgamates the wide and flourishing field ranging – to name just a few topics –

- from atmospheric science to hard and soft condensed matter
- from femtochemistry to nanotechnology
- from complex biological systems to single molecule research
- from clusters and colloids to catalysis and surface science
- from electro- to photochemistry

Papers from distinguished scientists worldwide, such as

Z. I. Alferov	G. Ertl	C. A. Mirkin
C. Amatore	C. Friend	C. N. R. Rao
C. D. Bain	J. S. Kilby	J.-M. Savéant
V. Balzani	H. Kroemer	R. J. Saykally
C. Bräuchle	R. Lavery	G. Wegner
E. A. Carter	J.-M. Lehn	C. Zannoni
A. Corma	R. D. Levine	R. N. Zare
F. C. De Schryver	H. Matsuhara	A. H. Zewail

### ChemPhysChem

A European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry

2002 Volume 3, 12 issues per year,  
ISSN Print 1439-4235  
ISSN Electronic 1439-7641

Available as a separate journal and as a part of attractive packages with *Angewandte Chemie (Int. Ed.)*. Please visit [www.chemphyschem.com](http://www.chemphyschem.com)

Virtual Sample Copy: FREE online access to full text of sample copy: [www.interscience.wiley.com](http://www.interscience.wiley.com)

Please enter my/our 2002 subscription to *ChemPhysChem*

At the institutional rate\*:

print  
 € 598,-  
 sFr 1028,-  
 US\$ 648,-

electronic  
 € 598,-  
 sFr 1028,-  
 US\$ 648,-

At the personal member rate:

print  
 € 148,- Europe  
 sFr 248,- Switzerland  
 US\$ 158,- All other countries

\* For a 5% premium, institutions can also choose both print and online access.

Please tick:  private  business

Name

Address

City/Postcode

Country

Date/Signature

Please send me a free sample copy

Please return this order form to your local bookseller or to:

Customers in Germany, Austria, and Switzerland:  
WILEY-VCH Reader Service  
P. O. Box 10 11 61,  
D-69451 Weinheim, Germany  
Phone: +49 (0) 6201-606 147  
Fax: +49 (0) 6201-606 172  
e-mail: [subservice@wiley-vch.de](mailto:subservice@wiley-vch.de)

Customers in all other areas:

John Wiley & Sons, Ltd.  
Journals Administration Department  
1 Oldlands Way  
Bognor Regis West Sussex, PO22 9SA, UK  
Phone: +44 (0) 1243-779 777  
Fax: +44 (0) 1243-843 232  
e-mail: [cs-journals@wiley.co.uk](mailto:cs-journals@wiley.co.uk)

WILEY-VCH

# Tensão superficial – sua natureza e efeitos

JOÃO PAULO MEDEIROS FERREIRA\*

## Resumo

As forças de tensão superficial estão presentes em muitas situações, sendo responsáveis por diversas propriedades, como a geometria de interfaces envolvendo fluidos, o carácter molhante ou não-molhante de líquidos ou

o efeito de capilaridade, entre outros. Concepções erróneas sobre estes conceitos são frequentes. Este artigo, de objectivos didácticos, revê os fundamentos sobre tensão superficial e interfaces, dando ênfase a interpretações a nível molecular.

## Introdução

O fenómeno da tensão superficial é ubíquo na Natureza e de extrema relevância em tecnologia, mas, paradoxalmente, é muitas vezes analisado de modo difuso e pouco claro. É do conhecimento comum que a tensão superficial é responsável pela forma esférica de pequenas gotas de água, como as gotas de orvalho, ou pelo facto de um mosquito ou um palito horizontal sobre uma superfície de água não se afundar. Neste artigo, dá-se uma explicação simples da tensão superficial e introduzem-se alguns dos fenómenos comuns dela decorrentes. A análise é acessível a um leitor sem formação específica em Química-Física ou Termodinâmica, que pretenda uma introdução ao tema ou uma revisão de conceitos-chave.

## Como surge a tensão superficial

A tensão superficial está presente nas interfaces entre dois fluidos (gás-líquido ou líquido-líquido) ou entre um fluido e um sólido (sólido-gás ou sólido-líquido).

Considere-se, por exemplo, a interface líquido-gás de uma tina com água (figu-

ra 1). As moléculas de água à superfície encontram-se num equilíbrio dinâmico, o que leva muitas delas a escaparem-se para a fase gasosa. Contudo, à temperatura ambiente, a densidade de moléculas de água na fase gasosa é muito menor do que na fase líquida. Ou seja, na direcção perpendicular à interface, regista-se uma variação brusca da densidade de água (Telo da Gama *et al.*, 1988). Consequentemente, as interacções intermoleculares para as moléculas à superfície são menores do que no seio do líquido. A quebra dessas interacções para originar a interface acarreta que esta esteja num estado de «tensão», isto é, com uma **energia em excesso** em relação ao seio do líquido. Embora a mudança de densidade entre fase líquida e gasosa ocorra em distâncias de várias vezes o tamanho molecular, a interface é frequentemente modelizada como uma zona de espessura zero, com a densidade a mudar descontinuamente do valor de líquido para o de gás. Acrescente-se que o aparente desequilíbrio de forças exercidas pelas fases líquida e gasosa nas moléculas à superfície constitui um paradoxo, dado que a interface em equilíbrio está macroscopicamente imóvel (Norde, 2003).

Por este facto, as análises mais recentes de tensão superficial favorecem a sua fundamentação termodinâmica (Norde, 2003), como será brevemente referido mais adiante.

Como resposta a essa tensão, energeticamente desfavorável, os sistemas tendem a minimizar as áreas das interfaces. É por esta razão que pequenas quantidades de líquidos formam gotas esféricas, como se observa em pequenos fluxos de água a cair de uma torneira, em água sobre uma superfície hidrofóbica, em mercúrio sobre variadas superfícies, etc. A mesma razão explica também por que uma fase gasosa no seio de um líquido forma pequenas «bolhas». A tendência para a forma esférica é compreensível, dado esta ser a geometria com menor razão área de superfície/volume. Todavia, a forma esférica só se verifica na ausência de outras forças significativas. Por exemplo, a água em repouso numa tina apresenta uma superfície sensivelmente plana e a superfície dos oceanos é paralela à da própria Terra, devido à força gravítica. Ou seja, para que a tensão superficial se faça observar, uma das fases tem de estar dispersa em pequenas quantida-

\* morada: Escola Superior de Biotecnologia – Universidade Católica Portuguesa, Rua Dr. António Bernardino de Almeida, 4200-072 Porto, Tel: 351225580027, e-mail: jpf@esb.ucp.pt

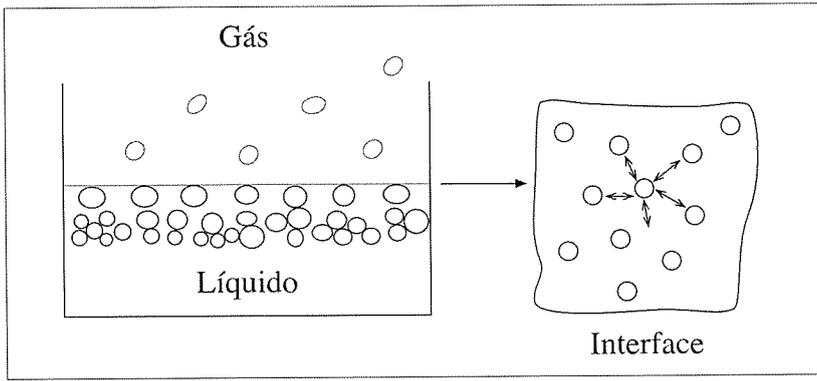


figura 1 Moléculas de água junto a uma interface líquido-gás, vista de lado (esquerda) e de topo (direita).

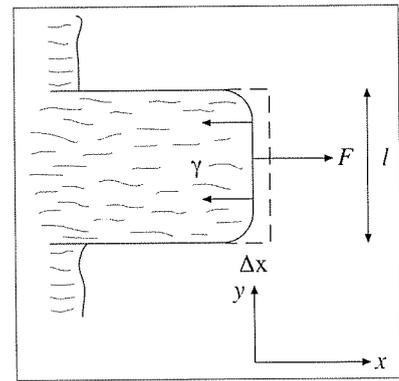


figura 2 Tensão superficial como energia por unidade de área de interface. (Adaptado de Evans e Wennerstrom, 1999).

des, criando uma elevada área superficial por unidade de volume.

A «tensão» da interface pode ser comparada à de um filme elástico esticado. Saliente-se que essa tensão é suposta actuar tangencialmente à superfície (e não perpendicularmente) e em todas as direcções, tal como na película elástica. A força que se faz sentir em qualquer linha imaginária da superfície por unidade de comprimento é a grandeza **tensão superficial**, representada frequentemente pelo símbolo  $\gamma$ .

A energia necessária para aumentar a área de interface é facilmente contabilizada através do exemplo da figura 2, em que existe um filme de líquido suportado por um arame. Suponha que se pretendia aumentar o tamanho do filme, isto é, executar um deslocamento  $\Delta x$  no arame. Para o fazer, é necessário aplicar uma certa força  $F$  no arame, que traduz precisamente a tensão superficial do lí-

quido ( $\gamma$  é a força do filme por unidade de comprimento na direcção  $y$ ). O trabalho associado a esse deslocamento é:

$$W = |F| \Delta x = 2\gamma l \Delta x \quad (1)$$

O factor 2 deriva de, na realidade, existirem duas interfaces líquido-ar, uma em cada lado do filme. No processo, é criada uma área interfacial  $\Delta A = 2 l \Delta x$ . Assim, o trabalho ou energia despendida por unidade de área de interface é  $W/\Delta A = \gamma$ . Esta observação constitui uma interpretação física alternativa de tensão superficial que, por isso, é também designada **energia de superfície** (símbolo  $\sigma$ ). Estas grandezas, equivalentes, têm dimensões de força por unidade de comprimento (SI:  $N \cdot m^{-1}$ ) ou energia por unidade de área (SI:  $J \cdot m^{-2}$ ).

Como exemplo, calcule-se a energia necessária para formar uma bolha de água (isto é, com fase gasosa no seu interior) de diâmetro 0.5 mm, à temperatura ambiente de 20°C. Seja  $W$  o trabalho ne-

cessário para originar a interface e  $A$  a área superficial da bolha ( $A = 4\pi r^2$ ). A tensão superficial deverá ser uniforme por toda a superfície. Assim, da definição de tensão superficial,

$$W = 2 A \gamma = 8 \pi R^2 \gamma \quad (2)$$

em que o factor 2 se deve à existência das interfaces interna e externa numa bolha. Para água a 20°C,  $\gamma = 0.073 J \cdot m^{-2}$ . A energia associada à formação da bolha, aparte outros factores, é, assim,

$$\begin{aligned} W &= 8 \pi R^2 \gamma = \\ &= 8 \pi (0.25 \times 10^{-3} m)^2 \times 0.073 J \cdot m^{-2} = \\ &= 4.59 \times 10^{-4} J \end{aligned}$$

Tendo um significado energético, a tensão superficial pode ser relacionada com propriedades termodinâmicas. Demonstra-se que, sendo a área  $\Delta A$  de interface originada a temperatura e pressão constantes, então o trabalho associado é igual à variação da energia de Gibbs do sistema, ou seja,  $W = \Delta G =$

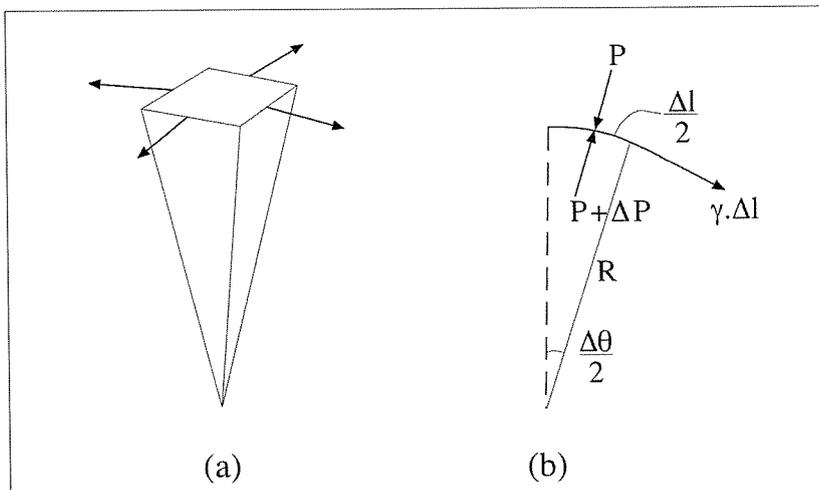
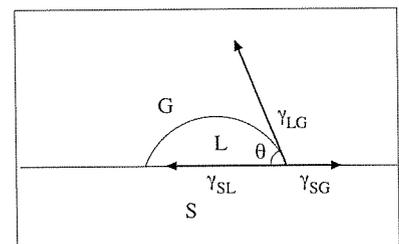


figura 3 (a) Tensão superficial nos bordos de uma «cunha» de uma esfera de líquido; (b) balanço de forças actuantes na sua superfície. (Adaptado de H. Rouse in Elementary Mechanics of Fluids, Dower Publications, NY, 1946).

figura 4 Tensões superficiais nas interfaces entre três fases distintas.



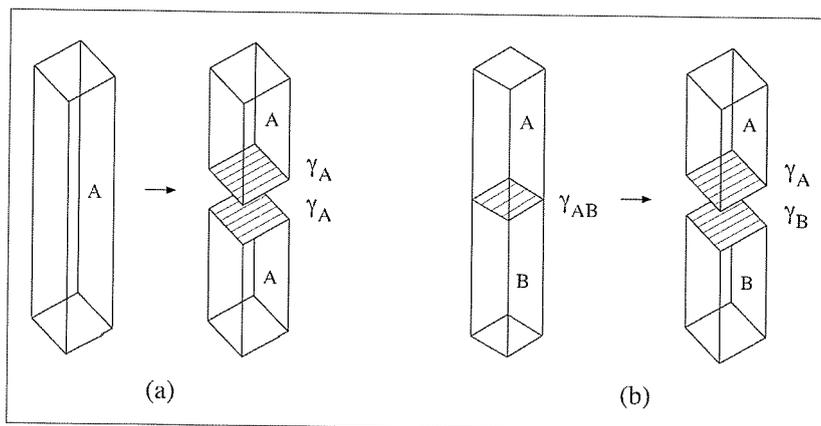


figura 5 (a) Trabalho de adesão ; (b) trabalho de coesão.

$\gamma \Delta A$  (Hunter, 1986). Numa forma dife-

$$\gamma = \left( \frac{\partial G}{\partial A} \right)_{T,P} \quad (3)$$

A análise termodinâmica dos fenómenos de interface é muito interessante, podendo o leitor aprofundar essa abordagem em Hunter *et al.* (1986).

A Tabela 1 indica tensões superficiais de vários líquidos em contacto com o ar. Repare-se, por exemplo, nos baixos valores de  $\gamma$  para hélio ou azoto líquidos. Tal explica-se pelo facto de estas moléculas serem apolares, apresentando fracas forças de interacção intermoleculares. Pelo contrário, líquidos metálicos têm, em geral, valores muito elevados

de tensão superficial, devido às fortes interacções da ligação metálica.

### Interfaces com curvatura

Quando uma interface tem uma certa curvatura, então cria-se uma diferença de pressão positiva entre o lado côncavo e o convexo. Isto é, a pressão no interior da superfície curva é superior à pressão exterior. Considere-se uma pequena «cunha» de uma esfera que, no topo, forma aproximadamente um quadrilátero de lado  $\Delta l$ , como mostra a figura 3. Faça-se um balanço das forças que actuam nesse quadrilátero, na direcção normal à superfície, ou seja, na vertical. A componente normal das forças de

tensão superficial que actuam na periferia é

$$4 \gamma \Delta l \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)$$

Esta força será igual e de sentido oposto à originária da diferença de pressão no topo,

$$4\Delta P(\Delta l)^2$$

Atendendo a que

$$\sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) = \frac{\Delta l/2}{R}, \text{ então}$$

$$4 \gamma \Delta l \frac{(\Delta l/2)}{R} = 4\Delta P(\Delta l)^2 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \Delta P = \frac{2\gamma}{R} \quad (4)$$

Esta expressão é conhecida por **equação de Laplace** ou **Young-Laplace** (Adamson e Gast, 1997). Calculem-se, por exemplo, as diferenças de pressão entre os lados interno e externo de bolhas de água de 0.5 mm e de 5  $\mu\text{m}$  de diâmetro. Para a bolha de 0.5 mm (500  $\mu\text{m}$ ):

$$\Delta P = \frac{2 \times 0.073 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}}{0.25 \times 10^{-3} \text{ m}} = 584 \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$$

Se a pressão exterior for a pressão normal ( $P_0 = 101325 \text{ Pa}$ ), a pressão no interior da bolha é aproximadamente 0.6% mais elevada. Para uma bolha de diâmetro 5  $\mu\text{m}$ , a diferença de pressão será 100 vezes maior que a anterior, ou seja,  $\Delta P = 58400 \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$ . Considerando uma pressão exterior normal, a pressão interna é agora 60% mais elevada!

Para superfícies que não são perfeitamente esféricas, a equação de Laplace é ainda aplicável, atribuindo a  $R$  um valor em cada ponto derivado dos raios de curvatura de duas secções normais à superfície e perpendiculares entre si,  $r_1$  e  $r_2$  (Hunter, 1986):

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \quad (5)$$

### Três fases em contacto

Em muitas situações coexistem três fases em contacto, originando mais do que uma interface. Por exemplo, uma gota de líquido sobre uma superfície sólida origina as interfaces sólido-gás (SG), sólido-líquido (SL) e líquido-gás (LG). Para cada uma delas, existirá uma energia de interface, traduzida por  $\gamma_{SG}$ ,  $\gamma_{SL}$  e  $\gamma_{LG}$ . Do mesmo modo, para uma gota de líquido à superfície de outro líquido imis-

Tabela 1: Tensões superficiais de líquidos em ar.

(Adaptado de A. Frohn, N. Roth, in *Dynamics of Droplets*, Springer, 2000, e de D. C. Giancoli, in *Physics – Principles with Applications*, 5ª ed., Prentice-Hall International, 1998)

Substância	$\gamma \times 10^3 \text{ (N} \cdot \text{m}^{-1}\text{)}$
Hélio líquido (-269°C)	0.12
Azoto líquido (-183°C)	6.6
Etanol (20°C)	22.8
Acetona (20°C)	23.7
Água (20°C)	72.8
(100°C)	59
Solução de sabão (20°C)	≈ 25
Sangue (37°C)	58
Mercúrio (20°C)	440
Ouro ( $T_b$ )*	197
Prata ( $T_b$ )	966
Ferro ( $T_b$ )	1872

\* $T_b$  é a temperatura de fusão normal

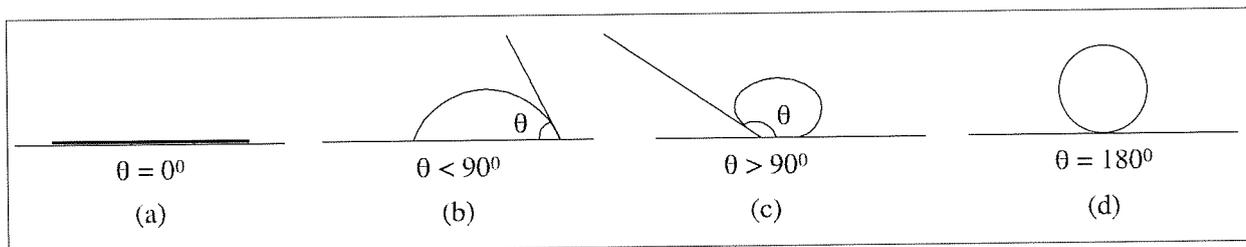


figura 6 Ângulos de contacto de líquidos com superfícies sólidas, para líquido: (a) perfeitamente molhante; (b) predominantemente molhante; (c) predominantemente não-molhante; (d) não-molhante.

cível – como uma gota de óleo à tona de água –, ocorrem as interfaces óleo-água (OW), óleo-gás (OG) e água-gás (WG). Sabe-se que o comportamento destas gotas pode ser diverso: podem tender a espalhar-se sobre a superfície em contacto – como água sobre madeira ou sobre vidro –, ou podem tender a minimizar o contacto com essa superfície – como mercúrio sobre madeira ou vidro. O resultado depende das forças intermoleculares que se estabelecem entre as fases. No caso da água sobre vidro ou madeira, formam-se interações fortes entre as moléculas polares da água e os grupos também polares desses materiais. Assim, devido a essas fortes **forças de adesão**, a água tende a espalhar-se ou a «molhar» essas superfícies. Inversamente, o mercúrio segmenta-se em pequenas esferas, com zonas de contacto com as superfícies muito restritas. Diz-se que o mercúrio não «molha» esses materiais. Este comportamento deve-se ao facto dos átomos de mercú-

rio preferirem interagir entre si com fortes **forças de coesão**, em detrimento da adesão com as superfícies. A forte coesão no mercúrio é devida à ligação metálica entre os seus átomos.

Ao espalhar-se no vidro, por exemplo, a água vai substituir as interações prévias entre o sólido e a fase gasosa, minimizando a energia total do conjunto. Esta energia é, portanto, ditada pelas energias das três interfaces presentes, traduzidas pelas tensões superficiais  $\gamma_{SG}$ ,  $\gamma_{SL}$  e  $\gamma_{LG}$  (figura 4). Numa situação de equilíbrio, é fácil deduzir uma relação entre estas três grandezas através de um simples balanço de forças segundo a direcção horizontal:

$$\gamma_{SL} + \gamma_{LG} \cos\theta = \gamma_{SG} \quad (6)$$

O significado do ângulo  $\theta$  é explicado um pouco adiante. A Eq. (6) é conhecida por **equação de Young** (Hiemenz e Rajagopalan, 1997).

Seguindo o princípio da minimização da energia, um líquido espalha-se sobre o sólido quando a energia da interface sólido-gás é superior à soma das energias das interfaces sólido-líquido e líquido-gás, ou seja, quando a diferença  $S = \gamma_{SG} - (\gamma_{SL} + \gamma_{LG}) > 0$ . Se  $S < 0$ , então o líquido não se espalha.  $S$  é conhecido por coeficiente de espalhamento.

Um modo alternativo de analisar este processo tem por base os conceitos de trabalho de adesão e trabalho de coesão. Para o efeito, considere-se uma coluna de um líquido com área de secção unitária, conforme representa a figura 5(a). Suponha-se que essa coluna é seccionada, criando-se duas novas interfaces de área unitária. A energia envolvida no processo é designada por **trabalho de coesão**,  $W_{AA}$  (Evans e Wennerstrom, 1999). Como sabemos, essa energia é também igual a  $2 \cdot \gamma_{AG}$ , ou seja,  $W_{AA} = 2 \cdot \gamma_{AG}$ . Considere-se, agora, a situação da figura 5(b), em que a separação é efectuada pela interface entre

figura 7 Forças de adesão ( $F_a$ ) e de coesão ( $F_c$ ) junto a um menisco, para os casos: (a)  $F_a > F_c$ ; (b)  $F_c > F_a$ . (Adaptado de T. Duncan in *Advanced Physics*, 5ª ed., John Murray, Londres, 2000).

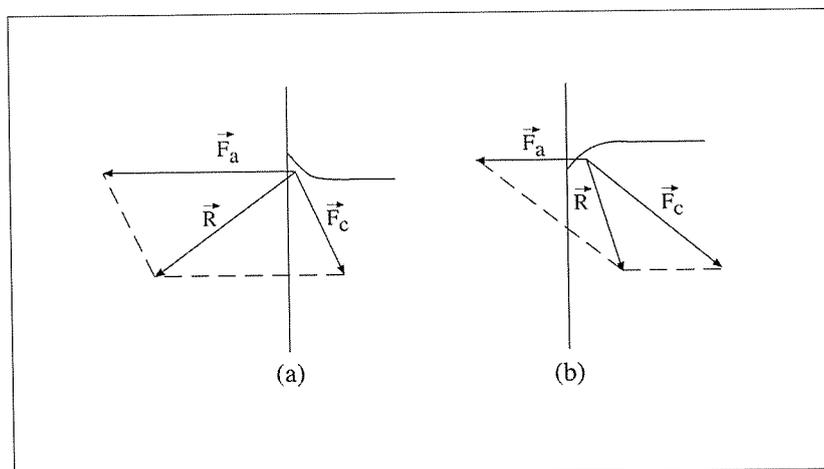
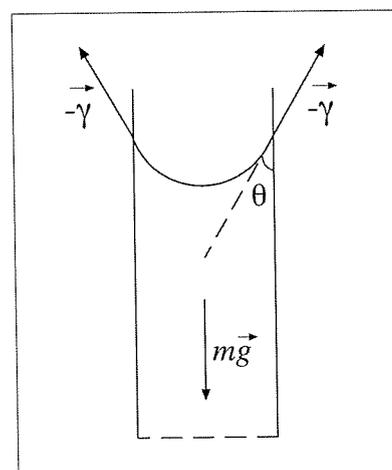


figura 8 Forças sobre uma coluna de líquido num capilar.



duas fases condensadas distintas, por exemplo, entre dois líquidos imiscíveis, ou entre um líquido e um sólido. A energia envolvida no processo é conhecida por **trabalho de adesão**,  $W_{AB}$ . Atendendo às interfaces que se originam e à interface que desaparece, reconhece-se que

$$W_{AB} = \gamma_{AG} + \gamma_{BG} - \gamma_{AB} \quad (7)$$

Esta expressão é conhecida por **equação de Dupré**. A interface entre A e B desaparece no processo, daí a parcela  $-\gamma_{AB}$  nesta igualdade. Por substituição, pode-se relacionar o coeficiente de espalhamento com  $W_{AA}$  e  $W_{AB}$ :

$$S = \gamma_{BG} - (\gamma_{AG} + \gamma_{AB}) = W_{AB} - 2 \cdot \gamma_A = W_{AB} - W_{AA} \quad (8)$$

Por exemplo, se A representar um líquido e B um sólido ou outro líquido imiscível com A, conclui-se que A espalha-se sobre B ( $S > 0$ ) quando o trabalho de coesão é superior ao trabalho de adesão. Atente-se que, em todas as situações envolvendo interfaces com uma fase gasosa, é necessário explicitar claramente a composição desta última: poderá ser ar, vapor saturado do líquido, vácuo, ou outra. As diferentes situações conduzem a expressões ligeiramente diferentes para os trabalhos de adesão e de coesão (ver, por exemplo, Moura Ramos, *Langmuir*, **13**, 6607-9, 1997, e referências neste artigo).

Retomemos a figura 4, onde se vê que o líquido forma um certo **ângulo de contacto**  $\theta$ , definido entre a superfície sólida

da e o plano tangencial à superfície líquida, medido através do líquido. A figura 6 sistematiza as diferentes possibilidades para  $\theta$ . Se  $0^\circ < \theta < 90^\circ$ , o líquido tem tendência a molhar a superfície e o oposto ocorre para  $90^\circ < \theta < 180^\circ$ . A água e o mercúrio em vidro formam ângulos de contacto muito próximos de  $0^\circ$  e de  $140^\circ$ , respectivamente.

As forças de adesão e de coesão ditam, por exemplo, a forma dos meniscos dos líquidos. Uma molécula pertencente ao menisco está sob a influência da tensão superficial associada à interface LG e da força de adesão com o sólido, que actua perpendicularmente à superfície sólida. A força resultante, soma destas duas, será normal à superfície do menisco (caso contrário, este não estaria estacionário). A figura 7 ilustra estas forças para casos com (a)  $\theta < 90^\circ$  e (b)  $\theta > 90^\circ$ . No primeiro caso,  $F_a > F_c$  e, no segundo,  $F_c > F_a$ .

O conjunto de forças entre sólido-líquido-gás é também responsável pelo fenómeno da **capilaridade**, observável, por exemplo, quando se mergulha um estreito tubo capilar num líquido. Em muitos casos, o líquido sobe no capilar, como água em vidro. É possível relacionar a altura da coluna de líquido com as suas propriedades. Considere-se a coluna de líquido da figura 8 e representem-se as forças exteriores que sobre ela actuem com uma componente vertical (as forças de atracção do sólido não se incluem, portanto, embora influenciem o ângulo de contacto). Conforme analisa-

do anteriormente, na periferia do menisco, as moléculas de água estão sob a influência da tensão superficial. Esta força tem de ser contrabalançada por uma reacção igual e de sentido oposto pelas paredes do capilar ( $-\gamma$ ). A reacção é uma força externa à coluna de líquido, responsável pela sua subida no capilar. A sua componente vertical por todo o menisco é  $(2\pi R)\gamma\cos\theta$ . O líquido subirá até ao ponto em que esta força é igualada pelo peso da coluna de líquido, corrigido pelo peso de uma coluna de fase gasosa equivalente,  $(\rho_L - \rho_G) \cdot g \cdot V$ , com  $V = \pi R^2 h$ . Assim,

$$\gamma \cos\theta (2\pi R) = (\rho_L - \rho_G) g (\pi R^2 h)$$

Em geral  $\rho_L \ll \rho_G$ , pelo que

$$\gamma \cong \frac{\rho_L g h R}{2 \cos\theta} \quad (9)$$

O método do capilar é muito utilizado para determinar tensões superficiais de líquidos (Adamson e Gast, 1997). Na prática, tomam-se tubos suficientemente estreitos para que  $\theta \cong 0^\circ$  ( $\cos\theta \cong 1$ ) ou  $\theta \cong 180^\circ$  ( $\cos\theta \cong -1$ ).

Como exemplo, considere-se a figura 9 e determine-se a altura  $h$  de equilíbrio, supondo que o capilar de vidro tem diâmetro 0.5 mm. Assumindo  $\theta = 0^\circ$ , da Eq. (9),

$$h = \frac{2 \gamma \cos\theta}{\rho_L g R} = \frac{2 \times 0.073 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1} \times 1}{998 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \times 9.8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} \times 0.5 \times 10^{-3} \text{ m}} = 0.0298 \text{ m} \cong 3 \text{ cm}$$

figura 9 Nível de líquido de equilíbrio e pressões em diferentes pontos de um capilar.

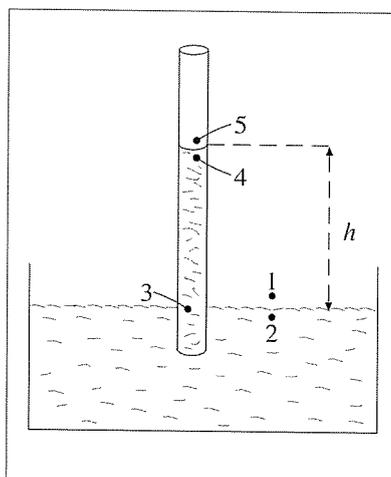
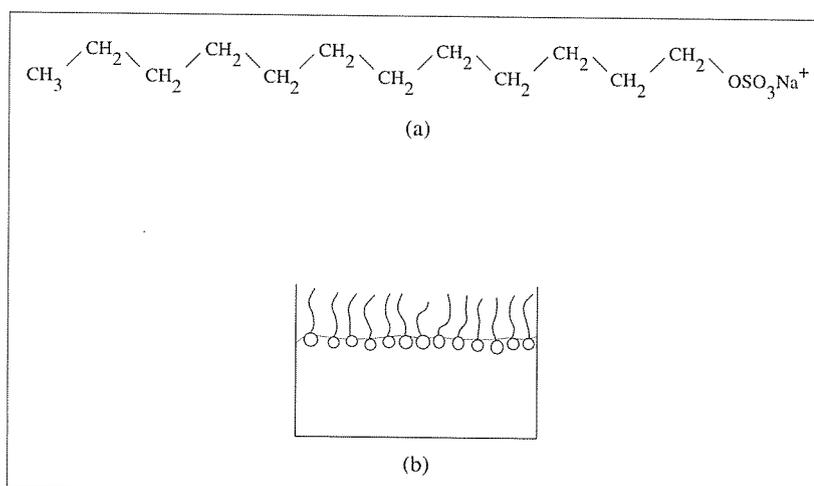


figura 10 (a) Estrutura química do agente tensoactivo dodecilsulfato de sódio; (b) arranjo das suas moléculas junto a uma interface líquido-gás.



É interessante observar os valores de pressão em diferentes posições. O ponto 1 apresenta a pressão exterior, por hipótese  $P_1 = 101325 \text{ Pa}$ . O ponto 2 está imediatamente abaixo da interface plana ar-água, pelo que  $P_2 = P_1$ . O ponto 3, estando ao mesmo nível de 1 e 2, terá  $P_3 = P_2 = P_1$ . Quanto a 4, situa-se a um nível  $h$  no líquido superior a 3. Assim,

$$P_4 = P_3 - \rho_l g h = \\ = 101325 \text{ Pa} - 958 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \times 9.8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} \times 0.03 \text{ m} = \\ = 101325 \text{ Pa} - 282 \text{ Pa} = 101043 \text{ Pa}$$

Para  $P_5$  será novamente a pressão ambiente, devendo-se notar que  $P_5 > P_4$ , resultado já esperado pela relação de Laplace.

Caso a experiência do capilar se realize com um líquido não molhante, como mercúrio, então observar-se-á que o nível no interior do capilar estabiliza abaixo da superfície livre exterior. A Eq. (9) é ainda aplicável, originando um valor negativo para  $h$ , situação conhecida por **depressão capilar**.

Refira-se ainda que a tensão superficial diminui com o aumento da temperatura (Shaw, 1980). Tal compreende-se atendendo a que a densidade dos líquidos diminui com a temperatura. Assim, as densidades no seio do líquido e na interface aproximam-se. No ponto crítico, não existe distinção entre fases líquida e gasosa, sendo a tensão superficial nula.

### Tensão superficial de soluções

A adição de um soluto a um líquido altera a sua tensão superficial. Em primeiro lugar, há que atentar a que as concentrações de solvente e de soluto na interface muito provavelmente não são iguais às prevalentes no seio da solução. Isto porque uma das espécies deve ser preferencialmente adsorvida na interface. A tensão superficial da solução pode ser maior ou menor que a do solvente puro. Quando o soluto se concentra na interface, então a tensão superficial da solução é menor, verificando-se o oposto quando o soluto evita a interface. Estes comportamentos podem ser explicados com base nas interações intermoleculares. Se as interações soluto-solvente são mais fortes que as soluto-fase gasosa, então o soluto evita a

interface e a tensão superficial da solução vem aumentada. Se o soluto atrai fracamente o solvente, ou apenas interage favoravelmente com uma parte da sua molécula, então a tensão superficial vem diminuída.

Entre os solutos que fazem aumentar a tensão superficial de água incluem-se os sais iónicos solúveis e os glúcidos. Os primeiros formam interações ião-dipolo com a água, enquanto os segundos, tendo muitos grupos hidroxilo, formam pontes de hidrogénio com a água. Um e outro tipo de interacção são fortes, pelo que estes solutos evitam a interface. Os solutos que diminuem a tensão superficial são designados **agentes tensoactivos** ou **sabões**. Muitas moléculas anfipáticas, isto é, simultaneamente com grupos hidrofóbicos e hidrofílicos, têm essa propriedade. Por exemplo, ácidos gordos ou espécies químicas com estruturas análogas, como as utilizadas na generalidade dos produtos de limpeza, baixam a tensão superficial [figura 9(a)]. Conforme dito atrás, tais solutos adsorvem na interface. A parte hidrofóbica da molécula orienta-se para a fase gasosa, permanecendo os grupos hidrofílicos em contacto com a água [figura 9(b)].

Os fenómenos associados à tensão superficial e aos agentes tensoactivos estão inerentes a uma imensidão de produtos correntes: produtos de limpeza e cosméticos; todo o tipo de tintas; adesivos, lubrificantes e revestimentos; espumas e aerossóis; a generalidade dos produtos alimentares; etc. Assim, uma clara compreensão daqueles fenómenos afigura-se como essencial na formação em ciências físico-químicas.

Na bibliografia são indicadas monografias de carácter geral, bem como vários artigos referentes a demonstrações e a determinações experimentais de valores de tensão superficial e ângulo de contacto.

### Bibliografia

#### Obras gerais:

A. W. Adamson, A. P. Gast, in *Physical Chemistry of Surfaces*, 6ª ed., Wiley-Interscience, 1997

D. F. Evans, H. Wennerstrom, in *The Colloidal Domain: Where Physics, Chemistry, Biology and Technology Meet*, 2ª ed., Wiley-CVH, 1999

D. J. Shaw, in *Introduction to Colloid and Surface Chemistry*, 3ª ed. Butterworths, 1980

M. M. Telo da Gama, B. S. Almeida, P. I. Teixeira, A superfície líquida, *Gazeta de Física*, 11, 1-9, 1988

M. V. Berry, The molecular mechanism of surface tension, *Phys. Educ.*, 6 (1971) 79-84

P. C. Hiemenz, R. Rajagopalan, in *Principles of Colloid and Surface Chemistry*, 3ª ed., Marcel Dekker, 1997

R. J. Hunter et al., Thermodynamics of Surfaces, in *Foundations of Colloid Science*, vol. I, pp 228-315, Clarendon Press, Oxford, 1986

W. Norde, in *Colloids and Interfaces in Life Sciences*, Marcel Dekker, Nova Iorque, 2003

### Demonstrações laboratoriais.

F. J. Arnáiz, The membrane analogy for surface tension in liquids, *J. Chem. Edu.*, **74** (1997), 1358

H. D. Gesser, A demonstration of surface tension and contact angle, *J. Chem. Edu.*, **77** (2000), 58-59

I. Karmanov, Wetting or non-wetting liquid?, *Phys. Edu.*, **35** (2000), 435-438

K. Kabza, J. E. Gestwicki, J. L. McGrath, Contact angle goniometry as a tool for surface tension measurements of solids, using Zisman plot method, *J. Chem. Edu.*, **77** (2000), 63-65

M. Dionísio, J. Sottomayor, A surface chemistry experiment using an inexpensive contact angle goniometer, *J. Chem. Edu.*, **77** (2000), 59-62

M. Sanchez-Rubio, B. Gordillo, D. S. Rushforth, An inexpensive Du Nüoy tensiometer, *J. Chem. Edu.*, **60** (1983), 70-71

T. P. Silverstein, Polarity, miscibility and surface tension of liquids, *J. Chem. Edu.*, **70** (1993), 253

# Cinquentenário da Simulação Computacional em Mecânica Estatística

## II. Desenvolvimento e Aplicações Fundamentais

FERNANDO M. S. SILVA FERNANDES\*

### 1. Introdução

Num artigo recente [1] abordámos, numa perspectiva histórica, os primeiros passos da simulação computacional em mecânica estatística através do método de Monte Carlo de Metropolis [2]. Destacámos as contribuições dos principais protagonistas assim como as objecções iniciais sobre o procedimento, levantadas por John Kirkwood, cuja resolução teve um papel crucial no reforço e na divulgação do método de Monte Carlo.

Neste artigo descrevemos o desenvolvimento da simulação computacional com a introdução do método da dinâmica molecular e comparamos os dois métodos. Referimos, também, algumas aplicações fundamentais e a situação do domínio em Portugal.

O cinquentenário da simulação computacional em mecânica estatística comemora-se no período de 2003 a 2007 correspondendo, respectivamente, às introduções definitivas do método de Monte Carlo em 1953 e do método da dinâmica molecular em 1957. Para além de justamente assinalar a efeméride, outro dos nossos objectivos é estimular os leitores que utilizam alguma forma de simulação molecular a contribuir, para *Química-Boletim da SPQ* com artigos sobre aplicações relevantes na sua investigação e docência. É certamente um dos modos de conhecer melhor a comunidade científica portuguesa neste domínio, a qual sendo ainda relativamente pequena tem fortes possibilidades de aumentar com o entusiasmo

das sucessivas gerações de investigadores.

### 2. Dinâmica Molecular versus Monte Carlo

Em 1957, Alder e Wainwright [3] introduziram o método da dinâmica molecular em mecânica estatística aplicando-o ao estudo da transição de fase de esferas rígidas, em consonância com as simulações por Monte Carlo de Wood e Jacobson [4]. Em trabalhos posteriores [5,6] de 1959 e 1960, fundamentaram o método e os respectivos algoritmos numéricos. Realizaram, de certa forma, o sonho dos Pais da Mecânica Estatística (Boltzmann, Maxwell, Gibbs e Einstein), isto é, a determinação de médias de propriedades mecânicas sobre o tempo. Em rigor histórico, no entanto, deve destacar-se que em 1955, Fermi, Ulam e Pasta [7] já tinham utilizado a técnica num estudo de osciladores não lineares relativamente ao problema da ergodicidade e da equipartição da energia. Fermi e Ulam também tiveram um papel relevante em Monte Carlo como referimos no artigo anterior [1].

Dada uma propriedade mecânica,  $f[\mathbf{r}^N(t), \mathbf{p}^N(t)] \equiv f(t)$ , a sua *média temporal* sobre um intervalo de tempo  $\tau$  (o tempo total de observação experimental que é muito maior do que o tempo médio das relaxações moleculares) é expressa por:

$$\langle f \rangle_\tau = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(t) dt \quad (1)$$

Recorde-se que uma propriedade mecânica, num instante  $t$ , depende explicitamente do microestado do sistema, o

qual é definido, classicamente, pela indicação dos vectores posição e momento linear de cada uma das  $N$  moléculas do sistema no instante  $t$ :

$$[\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots, \mathbf{r}_N(t); \mathbf{p}_1(t), \mathbf{p}_2(t), \dots, \mathbf{p}_N(t)] \equiv [\mathbf{r}^N(t), \mathbf{p}^N(t)] \quad (2)$$

Por exemplo, a temperatura e a pressão de um microestado (propriedades mecânicas instantâneas) são definidas a partir do teoremas da equipartição de energia e do virial, respectivamente:

$$T_{\text{inst}} = \frac{1}{3Nk} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} \quad (3)$$

$$P_{\text{inst}} = \frac{1}{3V} \left[ \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \right] \quad (4)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann,  $m_i$  a massa da molécula  $i$ ,  $V$  o volume do sistema,  $\mathbf{r}_{ij}$  o vector distância entre as moléculas  $i$  e  $j$ , e  $\mathbf{F}_{ij}$  o vector força exercida na molécula  $i$  pela molécula  $j$ .

Se as  $N$  moléculas forem monoatómicas existem  $3N$  graus de liberdade. Num espaço  $6N$ -dimensional (*o espaço das fases ou espaço fásico*,  $\Gamma$ , com  $3N$  eixos coordenados para as componentes das posições e  $3N$  eixos para as componentes dos momentos lineares) o microestado do sistema, no instante  $t$ , é representado por um único ponto.

Considere-se que a dinâmica do sistema de  $N$  moléculas obedece às equações do movimento de Newton:

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i(t)}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}^N)}{\partial \mathbf{x}_i}; \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (5)$$

\*Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, E-mail: fsilva@fc.ul.pt

de Newton ou, de modo equivalente, às equações de Hamilton:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)}{\partial p_i}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)}{\partial r_i} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

onde  $\mathbf{F}_i$  é a força exercida na molécula  $i$  pelas restantes  $N-1$  moléculas, derivada da energia potencial intermolecular  $U(\mathbf{r}^N)$ , e

$$H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}^N) \quad (7)$$

é o Hamiltoniano, ou seja, a soma das energias cinética e potencial do sistema.

Uma vez conhecidas as forças, ou a energia potencial intermolecular, a integração das equações do movimento permite calcular deterministicamente os microestados do sistema em instantes sucessivos, a partir de um microestado inicial  $[\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)]$ . Por outras palavras, é possível traçar a trajectória do sistema no espaço das fases e, sobre ela, determinar as médias temporais das propriedades mecânicas através do integral (1). Como essas médias correspondem às propriedades observáveis do sistema pode, aparentemente, conhecer-se tudo acerca do seu futuro e do seu passado, dado que as equações do movimento são simétricas em relação ao tempo. Esta é a base da histórica declaração de Laplace [8]:

*"Uma inteligência que, num dado instante, conhecesse todas as forças de que a natureza está animada, e a situação respectiva dos seres que a compõem, se além disso fosse suficientemente vasta para submeter estes dados à análise, abarcaria na mesma fórmula os movimentos dos maiores corpos do universo e os do mais leve átomo: nada seria incerto para ela, e o futuro, tal como o passado, estariam presentes a seus olhos. O espírito humano oferece, na perfeição que soube dar à astronomia, um pálido esboço de uma tal inteligência"*

Até que ponto as convicções de Laplace eram seguras transparece, soberbamente, quando Napoleão lhe disse, na

apresentação da 1.ª edição da *Mécanique Céleste* (citado em [9]):

*"Senhor Laplace, dizem-me que escreveu este longo livro acerca do sistema do universo e nem sequer mencionou o seu Criador"*

ao que Laplace respondeu prontamente: *"Não tive necessidade dessa hipótese"* As coisas, no entanto, não são realmente assim. Por um lado, a mecânica quântica impõe restrições na definição dos microestados instantâneos. Por outro lado, é impossível resolver analiticamente as equações do movimento para um sistema de multicorpos, o que impede a determinação da trajectória contínua do sistema no espaço fásico.

Quanto ao primeiro problema, o melhor que pode fazer-se, classicamente, é definir os microestados com uma certa imprecisão, ou seja, em vez de (2) deve escrever-se:

$$[\mathbf{r}^N \pm \Delta \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N \pm \Delta \mathbf{p}^N] \quad (8)$$

sendo  $\Delta \mathbf{r}^N \Delta \mathbf{p}^N \geq (h/4\pi)^{3N}$ , com  $h$  a constante de Planck, de acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg. Isto significa que quando se fala num microestado do sistema tal não deve ser compreendido como um ponto exacto do espaço fásico, mas como um hipervolume desse espaço centrado no ponto  $\mathbf{v} \equiv [\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N]$ . Assim, existe uma incerteza implícita, pois nesse hipervolume cabe uma infinidade de pontos.

Relativamente ao segundo problema, teremos de recorrer à análise numérica o que implica aproximações. A incerteza, afinal, é inevitável mesmo em sistemas determinísticos!

Suponhamos que o tempo total de observação,  $\tau$ , é dividido num número de intervalos,  $n_t$ , de comprimento constante e finito,  $\Delta t$ , tal que  $\tau = n_t \Delta t$ . Introduzindo esta expressão em (1) e considerando  $dt \approx \Delta t$ , obtém-se o integral numa forma discretizada:

$$\langle f \rangle_\tau \approx \frac{1}{n_t} \sum_{n=0}^{n_t} f(n \Delta t) \quad (9)$$

Escolhendo um algoritmo numérico para a integração das equações do movimento de Newton, por exemplo, o seguinte algoritmo de Euler modificado [10]:

$$\mathbf{v}_i [t + \Delta t] \approx \mathbf{v}_i [t] + (\mathbf{F}_i [t] / m_i) \Delta t$$

$$\mathbf{r}_i [t + \Delta t] \approx \mathbf{r}_i [t] + \mathbf{v}_i [t + \Delta t] \Delta t \quad (10)$$

é fácil implementá-lo num computador e gerar um conjunto de microestados, ou seja, traçar a sua trajectória do sistema de  $N$  moléculas no espaço fásico. Contudo, essa trajectória não é contínua, mas discreta, com os pontos separados por um intervalo de tempo constante  $\Delta t$  (o passo da integração numérica) que deverá ser inferior ao tempo das relaxações moleculares ( $\sim 10^{-16} \cdot 10^{-13}$  segundos) de forma a considerar os detalhes das respectivas colisões. Uma vez traçada a trajectória com  $n_t$  microestados, os valores médios das propriedades mecânicas são calculados sobre ela de acordo com a expressão (9). *Este é o fundamento do método da dinâmica molecular.*

Se o sistema for isolado a trajectória do sistema no espaço fásico percorrerá uma hipersuperfície finita de energia constante,  $S_E$ , cuja dimensão é  $6N-1$ . Dada a reversibilidade no tempo das equações do movimento, é plausível admitir-se, grosseiramente, que quando o sistema atingir o equilíbrio termodinâmico a sua trajectória no espaço fásico passa repetidamente *por quase todas* as hiper-regiões ( $R$ ) de  $S_E$ . Como o princípio da incerteza de Heisenberg impõe que a cada microestado corresponda um hipervolume do espaço fásico, e não um único ponto, poderemos visualizar esse espaço discretizado numa quantidade numerável, mas arbitrária, de hiper-regiões ( $R_v$ ), cada uma centrada (e identificada) por um ponto  $\mathbf{v} \equiv [\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N]$ . Então, a expressão (9) pode ser reescrita na forma:

$$\langle f \rangle_\tau \approx \frac{\sum_{v} \text{número de vezes que } R_v \text{ é visitada}}{\text{número total de pontos gerados } n_t} f(\mathbf{v}) = \sum_v P_v f(\mathbf{v}) \quad (11)$$

$P_v$  é a fracção do tempo total consumido nas visitas do sistema ao microestado  $\mathbf{v}$ , ou melhor, à correspondente hiper-região  $R_v$  do espaço fásico, o que não é mais do que a probabilidade de ocorrência do microestado  $\mathbf{v}$ .

A expressão (11) sugere que se for possível estabelecer a função de probabilidade,  $P_v$ , teremos um processo equivalente para calcular as médias das

propriedades mecânicas evitando a integração das equações do movimento. E, assim, entramos na *teoria dos ensembles estatísticos* desenvolvida essencialmente por Boltzmann e Gibbs. A ideia fundamental é a seguinte. Consideremos um conjunto com um número muito grande de cópias virtuais,  $M$ , dum sistema real em equilíbrio, cada cópia não necessariamente no mesmo microestado e sem uma sequência temporal definida, mas todas no mesmo estado termodinâmico de modo a que a totalidade dos microestados compatíveis com esse estado esteja representada. A esse conjunto chama-se *ensemble representativo do sistema termodinâmico*.

No caso particular do sistema ser isolado ( $N, V, E$  constantes), o conjunto designa-se por *ensemble microcanónico*, sendo representado por uma nuvem difusa de pontos cobrindo a hipersuperfície  $S_E$  do espaço fásico. A fracção de tempo que o sistema passa numa hiperregião  $R_v$  durante a sua evolução temporal (a probabilidade  $P_v$ ) deverá ser equivalente à fracção da superfície  $S_E$  ocupada pela área de  $R_v$ , isto é, à razão entre o número de pontos englobados pela área de  $R_v$  e o número total de pontos na superfície  $S_E$ . Assim, as médias das propriedades mecânicas obtidas sobre os  $M$  elementos do ensemble, designadas por *médias de ensemble*,  $\langle f \rangle_{\text{ens}}$ , devem ser iguais às médias temporais:

$$\langle f \rangle_{\tau} = \langle f \rangle_{\text{ens}} \quad (12)$$

Esta assunção, designada por *hipótese quase-ergódica*, constitui um dos postulados da mecânica estatística. A demonstração rigorosa desta equivalência levanta, no entanto, problemas de difícil resolução matemática, mas de interesse teórico fundamental como referiremos adiante.

Algumas considerações heurísticas conduzem à determinação da função de probabilidade  $P(N, V, E)$  para o ensemble microcanónico. As equações de Hamilton (6) indicam claramente que o hamiltoniano do sistema controla a dinâmica do sistema e, por conseguinte, também deve determinar as probabilidades de ocorrência dos microestados. Num sistema isolado, o hamiltoniano

(ou seja, a energia total do sistema) é uma constante do movimento o que sugere que os respectivos microestados devem ser equiprováveis. Deste modo, se o sistema tiver  $\Omega(N, V, E)$  microestados a condição de normalização impõe que para o ensemble microcanónico  $P(N, V, E) = 1/\Omega$  no equilíbrio termodinâmico. Esta assunção constitui outro dos postulados da mecânica estatística. Embora a energia total seja constante no ensemble microcanónico, a temperatura e a pressão instantâneas, por exemplo, sofrem *flutuações*, mas as médias de ensemble e temporal deverão ser iguais aos valores termodinâmicos de equilíbrio,  $T$  e  $p$  respectivamente.

Suponhamos, agora, que o sistema termodinâmico se encontra nas condições de temperatura, número de moléculas e volume constantes. Neste caso, a energia total flutua, isto é, na sua evolução temporal o sistema percorre hipersuperfícies com energias diferentes,  $E(i)$ . A este sistema corresponde o *ensemble canónico* ( $N, V, T$ ). Assumindo que o termostato e o sistema constituem, por sua vez, um sistema isolado em equilíbrio, para o qual já se estabeleceu a respectiva função de probabilidade, é fácil [11] deduzir a distribuição de probabilidade para o ensemble canónico:

$$P(N, V, T) = \frac{\exp[-\beta E(i)]}{\sum_{i=1}^M \exp[-\beta E(i)]} \quad (13)$$

com  $\beta = 1/kT$ , onde  $k$  é a constante de Boltzmann. A função (13) é a utilizada no método de Monte Carlo de Metropolis que referimos no artigo anterior [1]. Note-se que  $E(i)$ , na equação (13), representa a energia total, mas na equação (1) do artigo anterior representa a energia potencial.

O método de Monte Carlo gera estocasticamente ensembles estatísticos em que os seus elementos (microestados) não têm uma sequência temporal definida, mas uma determinada distribuição estatística de acordo com os constrangimentos termodinâmicos do sistema. Pelo contrário, o método da dinâmica molecular gera deterministicamente um conjunto de microestados dispostos sequencialmente no tempo. *A igualdade entre as médias de ensemble e temporais, assumida anteriormente, implica*

*que os dois métodos devem, em geral, ser equivalentes.*

Em 1953, Metropolis et al. [2] estabeleceram o método de Monte Carlo no formalismo canónico, ao passo que em 1957, Alder e Wainwright [3] desenvolveram o método da dinâmica molecular no formalismo microcanónico. Porém, note-se que se no método canónico de Monte Carlo utilizarmos como valor da temperatura o valor médio  $\langle T_{\text{inst}} \rangle$  obtido no método de dinâmica molecular microcanónico, então, o valor médio da energia  $\langle E(i) \rangle$  calculado em Monte Carlo deverá ser igual à energia constante,  $E$ , da dinâmica molecular, desde o momento que  $N$  e  $V$  sejam os mesmos nos dois cálculos. Isto é, existe uma equivalência entre os dois ensembles, podendo escolher-se um ou o outro (ou ainda outros formalismos) conforme o que se entender mais apropriado.

Para implementar o método da Dinâmica Molecular (DM) é imprescindível, para além das posições e velocidades iniciais, o conhecimento da força exercida em cada molécula, a qual é derivada do potencial intermolecular  $U(\mathbf{r}^N)$ , e um algoritmo para a integração numérica das equações do movimento. O método faz a amostragem simultânea dos espaços configuracional e das velocidades gerando, deterministicamente, um conjunto de microestados com uma sequência temporal bem definida.

O método de Monte Carlo (MC) na sua versão mais típica apenas faz, como vimos [1], a amostragem do espaço das configurações, gerando estocasticamente um ensemble de configurações com probabilidades de transição proporcionais à distribuição canónica de Boltzmann. Dado que o tempo não é uma variável do método, as configurações não têm uma sequência temporal definida como em dinâmica molecular. Por outro lado, como a geração das configurações é determinada pela energia potencial do sistema não é necessário calcular as forças. Assim, para a implementação de MC teremos de conhecer a configuração inicial, a energia potencial intermolecular e a lei de probabilidade do ensemble.

De acordo com a hipótese quase-ergódica, os dois métodos devem ser equiva-

lentes no que respeita a propriedades termodinâmicas de equilíbrio. No entanto, devido à natureza dos métodos, DM é essencial para o estudo de propriedades dependentes do tempo. Todavia, é possível interpretar MC em termos de funções de correlação de modelos com dinâmica estocástica [12] permitindo, nessa perspectiva, a simulação de alguns processos dinâmicos. Em resumo, os dois métodos complementam-se e a sua utilização depende directamente dos casos objectivos que se pretendam estudar.

### 3. Condições de fronteira

Comum a ambos os métodos é o problema das *condições de fronteira*. Os sistemas macroscópicos reais contêm um número de moléculas da ordem de  $10^{23}$ . É obviamente impossível tratar explicitamente esse número por DM ou MC. Na verdade, sendo estes métodos os pilares da área da *simulação molecular*, distinguem-se de outros métodos computacionais, e aproximações teóricas, pelo facto de fazerem evoluir as coordenadas moleculares de acordo com o cálculo rigoroso das energias ou forças intermoleculares. Estamos, claramente, perante um problema de escalas de espaço e de tempo que é necessário otimizar tanto mais quanto maior for a complexidade do sistema. Por conseguinte, representa-se o sistema macroscópico através de uma amostra com um número de moléculas relativamente pequeno ( $\sim 10^3$ - $10^6$ ) que se introduzem numa caixa tridimensional, a *caixa de simulação* (CS), frequentemente cúbica. As dimensões da caixa e o número de moléculas definem a densidade do sistema. A caixa de simulação supõe-se rodeada por imagens virtuais dela própria, estendendo-se por todo o espaço tridimensional, de modo a que as posições relativas e velocidades moleculares (estas no caso de DM) em cada caixa-imagem sejam exactamente iguais às de CS conforme se representa, a duas dimensões, na figura 1. De modo a eliminar os efeitos de superfície, devidos às reduzidas dimensões da amostra, considera-se que cada molécula  $i$  de CS está centrada numa caixa virtual com as mesmas dimensões, obtida pela translação de CS, e que interacciona com as ou-

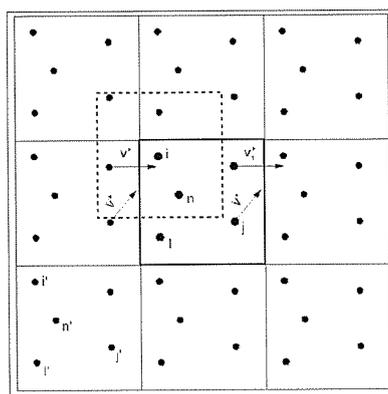


figura 1 Condições de fronteira periódicas (adaptado de [55]).

tras partículas reais, ou com as suas imagens, aquelas que se encontrarem na caixa virtual. Desta forma, apenas é explicitamente tratado um número de moléculas igual ao da amostra. Quando uma determinada molécula sair de CS através de uma parede, então, uma das suas imagens entrará pela parede oposta com a mesma velocidade, conservando-se, assim, a densidade e a simetria do sistema. Como o número de moléculas da amostra e as dimensões de CS são muito pequenas relativamente a um sistema macroscópico, é necessário contabilizar, também, *as contribuições de longo alcance* devidas às moléculas que se encontrem fora de CS. Esses cálculos dependem do tipo do potencial intermolecular e são realizados tirando partido da simetria imposta pelas condições de fronteira [13, 14]. Estas, conferem ao sistema uma periodicidade que, à primeira vista, pode parecer totalmente irreal e sujeita a correlações artificiais, em particular no estado líquido. As condições de fronteira justificam-se considerando, como veremos no próximo parágrafo, que um sistema macroscópico real poder ser visualizado como um conjunto de sub-sistemas independentes com distribuições moleculares semelhantes, desde o momento que o número de moléculas na caixa de simulação seja suficientemente grande. De qualquer modo, os efeitos das condições periódicas e a maneira de os ultrapassar são bem conhecidos [13,14].

Finalmente, no caso particular da simulação de microagregados moleculares ("clusters") no vazio, ou constringidos em cavidades microscópicas, uma área

de grande interesse geral [15], é claro que a imposição de condições de fronteira periódicas não é necessária.

### 4. Equilíbrio, Não-equilíbrio, Ergodicidade e Mistura

Quando Boltzmann e Maxwell, na segunda metade do século XIX, estabeleceram os fundamentos da mecânica estatística, reconheceram que as propriedades termodinâmicas observáveis são médias temporais de propriedades microscópicas, expressas pela equação (1). Debateram-se, no entanto, com dois problemas. Por um lado, a resolução analítica desse integral é impraticável para sistemas de multicorpos pois implica, por sua vez, a prévia integração analítica das equações do movimento a qual é impossível. Na época, a respectiva resolução numérica estava fora de questão por óbvios motivos operacionais. Por outro lado, tinham o problema da irreversibilidade macroscópica versus a reversibilidade microscópica, esta implícita nas equações do movimento. Quando se observa um sistema num estado de "não equilíbrio" ele tende irreversivelmente para o equilíbrio termodinâmico. Nessa evolução, as observáveis macroscópicas dependem explicitamente do tempo, mas mesmo assim são valores médios de propriedades microscópicas. Por outras palavras, enquanto que em estados termodinâmicos de equilíbrio as médias são independentes do tempo, no caso de sistemas em "não equilíbrio" elas dependem explicitamente do tempo.

Como expressar, formalmente, essas *médias de "não equilíbrio"* em cada instante? A observação experimental de um sistema macroscópico, num intervalo de tempo muito curto, fornece-nos efectivamente médias instantâneas das propriedades microscópicas. Na verdade, um sistema macroscópico pode assumir-se como constituído por um conjunto de muitos sub-sistemas. Se estes tiverem dimensões suficientemente grandes, é de esperar que o comportamento molecular num dos sub-sistemas não esteja correlacionado com o comportamento dos restantes e que as distribuições moleculares sejam semelhantes em cada um. A distância através de um desses sub-sistemas será então bastante maior

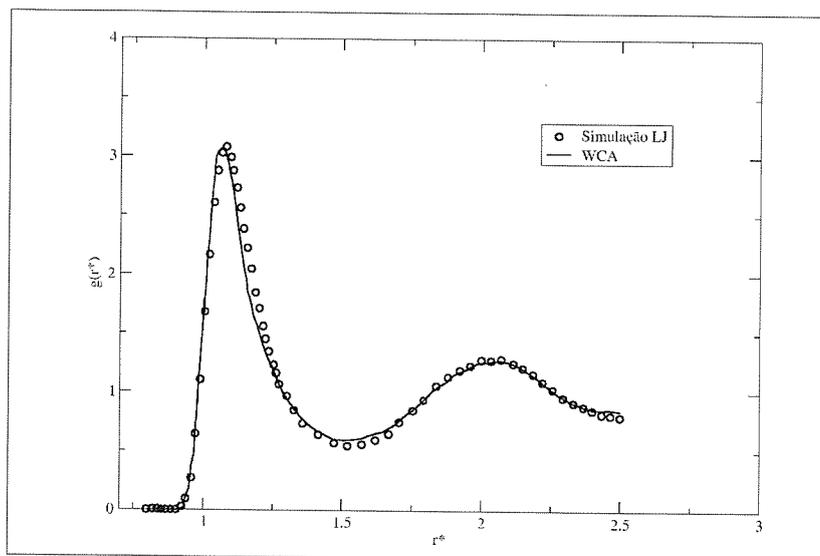


figura 2. Funções de distribuição radial para o Lennard-Jonesium obtidas por simulação e pela teoria WCA (adaptado de [19]).

do que o comprimento ou alcance das correlações espaciais e os sub-sistemas podem também considerar-se macroscópicos. Assim, uma medição instantânea no sistema macroscópico global é equivalente a muitas medições independentes nos sub-sistemas macroscópicos, ou seja, a observação experimental deve corresponder a uma média de ensemble num dado instante. Em resumo, um sistema macroscópico real pode ser visualizado como um ensemble de sub-sistemas macroscópicos e independentes.

A introdução do conceito de ensemble estatístico foi, deste modo, natural e inevitável. Permite uma alternativa à integração das equações do movimento. Adicionalmente, torna possível uma formalização matemática rigorosa tanto dos processos de equilíbrio como dos de “não equilíbrio” e da evolução destes até ao equilíbrio.

Em todas estas questões está subjacente um aspecto subtil. Vimos que para sistemas em equilíbrio as médias de ensemble deverão, em princípio, ser iguais às médias temporais. Por outras palavras, assume-se que o sistema na sua evolução temporal percorre, grosseiramente, quase todos os microestados acessíveis no espaço fásico, os quais também se assumem estar representados no ensemble. Esta propriedade designa-se por *ergodicidade*. Mas suponhamos um sistema em “não equilíbrio” num determinado instante. Ele será representado no espaço fásico por uma nuvem difusa de pontos. À medida que

o tempo passa, cada ponto do ensemble segue a sua própria trajectória de acordo com as equações do movimento. Será a condição de ergodicidade suficiente para garantir que, ao longo do tempo, as médias instantâneas de ensemble tendem irreversivelmente para os valores de equilíbrio? Mostra-se que a condição de ergodicidade é necessária, mas não suficiente para que tal aconteça [16]. Existe, de facto, uma hierarquia de condições em que a ergodicidade é a menos forte. Para assegurar que os ensembles estatísticos tendem irreversivelmente para o equilíbrio, como nos sistemas reais, é necessária uma outra condição mais forte do que a ergodicidade, designada por *mistura*. Em termos simples, um ensemble possui a propriedade de mistura, ou seja, é *misturante*, se sendo  $Q$  e  $R$  regiões arbitrarias de  $S_E$ , e o ensemble estiver inicialmente distribuído uniformemente em  $Q$ , então a fracção de membros do ensemble com pontos em  $R$  ao fim de um intervalo de tempo suficientemente grande, mas finito, tende para um limite igual à fracção de área de  $S_E$  ocupada por  $R$ . A existência ou não de mistura prende-se directamente com o comportamento de trajectórias cujas condições iniciais difiram infinitesimalmente entre si, isto é, com a instabilidade ou estabilidade das trajectórias. A instabilidade das trajectórias provem do facto de uma ligeira alteração na direcção do movimento de qualquer partícula do sistema, num dado instante, ser amplificada exponencialmente em cada colisão com a

superfície convexa de outra partícula. Assim, ao fim de um certo número de colisões os movimentos das partículas devem estar descorrelacionados com os seus estados iniciais. Tal confere ao sistema um comportamento *caótico*, embora determinístico (o chamado *caos determinístico em sistemas dinâmicos*), podendo justificar a característica probabilística dos sistemas moleculares e a sua irreversibilidade macroscópica. Por exemplo, a instabilidade das trajectórias e a irreversibilidade pode observar-se facilmente em cálculos de dinâmica molecular de sistemas de esferas rígidas: se as equações do movimento forem integradas numericamente do instante 0 ao instante  $t$  e tentarmos recuperar o estado inicial, integrando de modo inverso do instante  $t$  ao instante 0, obteremos não o estado inicial, mas um estado totalmente diferente [16]. Tal deve-se a que a integração numérica é instável relativamente a pequenos erros de arredondamento durante a simulação. Eles desempenham o mesmo papel das inevitáveis perturbações externas num sistema real.

A mistura é uma condição mais forte do que a ergodicidade. Um sistema misturante é ergódico, mas o inverso não é necessariamente verdadeiro. A assunção básica da mecânica estatística é que os sistemas moleculares são ergódicos e pelo menos misturantes devido às sucessivas colisões entre as suas partículas convexas.

Aos leitores interessados nestes aspectos de importância fundamental, que também podem ser analisados por simulação computacional, recomendamos os artigos da autoria de Lebowitz e Penrose [16] e de Varandas [17].

## 5. Aplicações fundamentais

### 5.1. Esferas rígidas

Como já referimos, Alder e Wainwright nos seus trabalhos pioneiros de dinâmica molecular trataram sistemas de esferas rígidas, cujo potencial é:

$$u(r_{ij}) = \begin{cases} \infty & \text{se } r_{ij} \leq \sigma \\ 0 & \text{se } r_{ij} > \sigma \end{cases} \quad (14)$$

onde  $r_{ij}$  é a distância entre as esferas  $i$  e  $j$ , e  $\sigma$  o diâmetro das esferas.

Neste caso particular, a dinâmica das partículas é decomposta em colisões entre pares de esferas, a partir de uma tabela ordenada dos tempos das sucessivas colisões. Entre as colisões, as partículas movem-se em linha recta de acordo com a dinâmica de choques elásticos. Foi determinada a equação de estado e comparada com a obtida por Monte Carlo [4]. Demonstrou-se, inequivocamente, que esse sistema apresenta uma transição fluido-sólido de 1ª ordem, cuja localização exacta foi determinada por Hoover e Ree [18] em 1968, com base na igualdade dos potenciais químicos e pressões no ponto da transição. Este resultado ilustra a capacidade de descoberta da simulação computacional, pois até essa altura duvidava-se da existência de tal transição. E teve como consequência, por exemplo, o estabelecimento da teoria de Weeks, Chandler e Andersen (WCA) [19] que formalizou a chamada *imagem de Van der Waals* dos líquidos, sólidos e transições de fase. Segundo essa imagem, as interações moleculares atractivas, de longo alcance, contribuem para fixar o volume dos sistemas, mas as distribuições e movimentos das moléculas nesse volume são determinadas, essencialmente, pelo empacotamento e efeitos estéricos locais produzidos pelas forças repulsivas de curto alcance, podendo estas ser modeladas pelo potencial de esferas rígidas. E como este potencial dá lugar a uma transição fluido-sólido, esta deve

estar intimamente relacionada com a fusão e solidificação observadas em sistemas reais. Nesta aproximação simples, as interações atractivas são tratadas em termos de um campo médio (um potencial uniforme subjacente) cuja força resultante é nula, não tendo efeito na estrutura ou dinâmica molecular, mas apenas conferindo a energia coesiva que torna o sistema estável a uma dada densidade e pressão.

A estrutura de um líquido pode ser analisada, por exemplo, através da *função de distribuição radial*,  $g(r)$ , que mede a densidade local à distância,  $r$ , de uma molécula qualquer. Na figura 2, mostra-se a comparação das funções de distribuição radial para o sistema de Lennard-Jones (que trataremos em particular na próxima secção) obtidas por simulação e pela teoria WCA na zona do ponto triplo. O acordo é excelente.

A teoria WCA é um marco relevante na análise dos sólidos e líquidos densos com implicações na teoria das perturbações. As suas previsões concordam com os resultados da simulação e da experiência para um número considerável de sistemas. Mas sendo uma teoria tem, inevitavelmente, limitações que é necessário remover. Este é o papel essencial da investigação científica. Destaque-se, também, a importância da descoberta realizada pela simulação computacional e como é surpreendente que um modelo tão simples, como o de esferas rígidas, consiga explicar fenómenos complexos da natureza.

As simulações pioneiras de Alder e Wainwright estenderam-se aos aspectos dinâmicos, em particular ao fenómeno da difusão através da análise das funções de auto-correlação da velocidade obtidas por dinâmica molecular.

A função de auto-correlação da velocidade,  $Z_v(t)$ , define-se como:

$$Z_v(t) = \langle \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle \quad (15)$$

onde  $\mathbf{v}_i$  é o vector velocidade da molécula  $i$  e  $\langle \rangle$  indica uma média dupla sobre todas as moléculas do sistema e sobre diferentes origens de tempo.

A mecânica estatística mostra que o coeficiente de auto-difusão,  $D$ , é dado por:

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty Z_v(t) dt \quad (16)$$

A figura 3, apresenta formas típicas das funções de auto-correlação da velocidade normalizadas,  $c_v(t) = Z_v(t)/Z_v(0)$ , para líquidos densos e pouco densos. Para além de proporcionarem o cálculo dos coeficientes de auto-difusão é, no entanto, a interpretação dessas funções que se revela verdadeiramente informativa sobre os detalhes microscópicos da dinâmica dos líquidos. Assim, em geral, elas tendem assintoticamente para zero, significando que, ao longo do tempo, as moléculas vão perdendo a "memória" das suas velocidades iniciais. Contudo, previamente e para líquidos densos, existe uma clara retro-difusão das moléculas, indicada pelas correlações negativas. Isto significa que, em média, cada molécula está no interior de uma gaiola, formada pelas suas vizinhas mais próximas, executando modos vibracionais de movimento até que, cooperativamente, a gaiola se abra e permita a difusão definitiva da molécula. Além disso, repare-se que a densidades baixas a cauda da função persiste sistematicamente em valores positivos próximos de zero, enquanto que a densidades elevadas ela persiste em valores negativos próximos de zero. Este fenómeno foi explicado pelas simulações pioneiras de Alder e Wainwright [20] que mostraram a existência do chamado *efeito de vórtice*: o movimento de uma molécula através de um líquido cria à sua volta uma corrente retardada na direcção da velocidade inicial. A densidades baixas, onde a direcção inicial do movimento tem tendência a manter-se, o efeito dessa corrente é "empurrar" a molécula na direcção inicial. Isto resulta numa correlação positiva ao longo do tempo. A densidades elevadas, por outro lado, a direcção inicial do movimento é em média invertida passado pouco tempo. Neste caso, a corrente retardada provoca um arrastamento extra na molécula, em instantes posteriores, dando lugar a uma persistente correlação negativa. Esta interpretação é mais um belo exemplo do poder da simulação molecular no esclarecimento dos processos microscópicos.

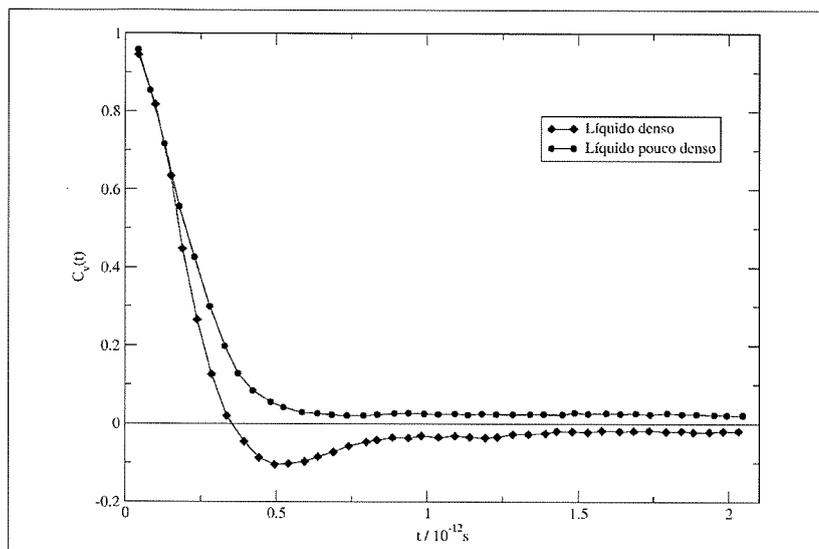


figura 3. Funções de autocorrelação da velocidade (adaptado de [55]).

Repare-se que para calcular a função de auto-correlação da velocidade é necessário que os microestados estejam ordenados sequencialmente no tempo. Como tal, o método da dinâmica molecular é o mais adequado para o cálculo dessa propriedade e de outras propriedades dependentes do tempo. De facto, no método de Monte Carlo a variável tempo, como vimos, não é explícita e as configurações são geradas estocasticamente sem uma ordem aparente. Curiosamente, Huitema e Eerden [21] mostraram, recentemente, que é possível estimar um tempo físico em Monte Carlo e calcular funções de correlação da velocidade por ambos os métodos. Embora para escalas de tempo pequenas a dinâmica das partículas seja diferente nos dois métodos, ela torna-se semelhante para escalas de tempo suficientemente grandes.

## 5.2. Lennard-Jonesium

O potencial de Lennard-Jones [22]:

$$u(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (17)$$

onde  $\epsilon$  é o fosso do potencial e  $\sigma$  aproximadamente o diâmetro molecular, é o modelo de potencial mais típico em simulação molecular. Reproduz com notável sucesso algumas das propriedades dos gases nobres e outros sistemas com moléculas esfericamente simétricas. Está, também, na base da construção de potenciais efectivos para outras espécies mais complexas incluindo sistemas bioquímicos, bem como no desenvolvimen-

to de novos métodos de simulação e teste de teorias analíticas. Assim, o modelo passou a representar uma "nova espécie química" virtual designada, convencionalmente, por *Lennard-Jonesium* (LJ). Não admira, por conseguinte, que LJ tenha sido utilizado nas simulações pioneiras do argon, por Monte Carlo e dinâmica molecular, realizadas respectivamente por Wood e Parker [23] em 1957 e por Rahman [24, 25] em 1964 e 1966. Seguiram-se, entre outros, os trabalhos fundamentais de Verlet [26, 27], Levesque et al. [28, 29], Hansen e Verlet [30] e McDonald e Singer [31]. Testaram a robustez dos métodos, analisaram alguns aspectos fundamentais das teorias analíticas, traçaram diagramas de fases e implementaram algoritmos e técnicas computacionais básicas que têm prevalecido desde então.

É de sublinhar, contudo, que a primeira simulação por dinâmica molecular de um modelo para um sistema real (com um potencial diferente do de LJ) foi efectuada pelo grupo liderado por Vineyard [32], em 1959, sobre os efeitos da radiação em cristais de cobre.

Nas figuras 4 e 5 apresentam-se, respectivamente, uma equação de estado e o diagrama de fases do Lennard-Jonesium obtidos por simulação e a sua comparação com resultados experimentais para o argon. Utilizam-se unidades reduzidas:  $T^* = T k/\epsilon$ ;  $\rho^* = \rho\sigma^3$ ;  $r^* = r/\sigma$ ;  $p = p\sigma^3/\epsilon$ .

Os trabalhos de 1960 e do princípio da década de 70 completaram o ciclo da

adolescência da simulação computacional em mecânica estatística. Iniciou-se, então, a sua idade adulta.

## 5.3. Outros sistemas e ensembles

A descrição exhaustiva dos progressos da simulação computacional, desde o fim da década de 60 até ao presente, ultrapassaria a índole deste artigo. Portanto, no que se segue, limitar-nos-emos a considerações de natureza geral e referiremos duas aplicações, na área da Electroquímica, desenvolvidas no nosso grupo de investigação. Um panorama mais detalhado das aplicações da simulação em mecânica estatística pode ser visto, por exemplo, nas referências [7, 10, 13-14, 33-35].

No início da década de 70 houve um incremento considerável do poder computacional. Os supercomputadores começaram a sair de grandes instituições governamentais e a serem acessíveis às universidades. Das primeiras simulações, aplicadas a sólidos e líquidos atômicos, passou-se ao estudo de sistemas de moléculas diatómicas e poliatômicas, iões, sais fundidos, soluções electrolíticas e misturas com complexidade crescente. Foi dada especial atenção aos algoritmos numéricos, às técnicas de optimização, aos efeitos das condições de fronteira periódicas e à dependência dos resultados do número de moléculas utilizado nas simulações. Um dos aspectos essenciais era tratar o maior número possível de moléculas com tempos de cálculo que fossem compatíveis com as máquinas e a partilha dos seus recursos

pelos diferentes grupos de utilizadores. De facto, ainda estava longe a geração dos PC's e estações pessoais dedicadas a um único grupo de investigação.

A inclusão de constrangimentos e de potenciais intramoleculares permitiu a generalização das simulações a sistemas bioquímicos [34]. Ainda que este tipo de simulações tivesse sido tecnicamente possível no início da década de 1980, havia ainda problemas importantes relativos ao conhecimento dos campos de força e ao tempo total sobre o qual as moléculas podiam ser simuladas. No caso da dinâmica molecular, as equações do movimento devem ser numericamente integradas com um incremento de tempo que considere as relaxações moleculares mais rápidas ( $10^{-16}$  a  $10^{-15}$  s) enquanto que o problema de interesse tem escalas de tempo características entre  $10^{-6}$  e 1 s. Tal requiere simulações com centenas de milhões de incrementos de tempo, para além das possibilidades dos computadores mais rápidos então existentes. Um exemplo deste tipo de problema é a simulação completa do enrolamento de proteínas com o objectivo de prever a estrutura terciária a partir da sequência dos seus aminoácidos. É importante sublinhar que a determinação de campos de força adequados e a necessidade de estender os cálculos a grandes escalas de tempo e espaço é ainda, presentemente, um problema que a simulação molecular tem de considerar seriamente.

Como vimos, o método de Monte Carlo foi inicialmente implementado no ensemble canónico em 1953. Nas décadas seguintes foi generalizado aos ensembles isobárico-isotérmico, grande-canónico e microcanónico [13, 14, 36, 37]. Os anos 80 e 90 viram o nascimento dos métodos de Gibbs-Ensemble e de Gibbs-Duhem [14], duas técnicas de crucial importância para a simulação directa do equilíbrio de fases. Ao mesmo tempo, a determinação de energias livres, entropia e potenciais químicos tornou-se vulgar. Sublinhe-se que o cálculo destas propriedades levanta problemas técnicos de particular delicadeza e interesse teórico. De facto, não são propriedades mecânicas, isto é, não estão definidas para cada microestado (como, por

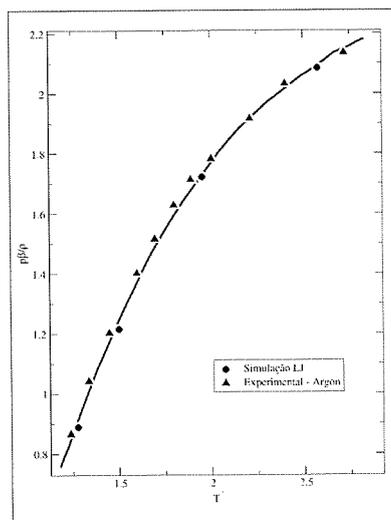


figura 4 Equações de estado do Lennard-Jonesium e argon,  $p^* = 0.6$  (adaptado de [55])

exemplo, a pressão e a energia interna), mas dependem directamente do volume total ocupado pelo ensemble de microestados, ou seja, do *volume fásico* do sistema. Assim, requerem métodos de simulação específicos ou, em alternativa, a integração termodinâmica das equações de estado obtidas pelos métodos de simulação usuais [14].

O método da dinâmica molecular, pelo contrário, foi originalmente implementado no ensemble microcanónico e somente nos anos 80 e 90 foi definitivamente generalizado aos restantes ensembles, principalmente através do conceito de *ensemble estendido* no contexto da mecânica de Lagrange e de Hamilton [13, 14, 34, 35]. No entanto, ainda em 1971, Woodcock [38] estendeu o método da dinâmica molecular, embora de forma heurística, a simulações a temperatura constante.

As propriedades de transporte podem ser determinadas através das funções de correlação calculadas nos sistemas em equilíbrio, com base nas relações generalizadas de Green-Kubo [39]. Vimos, atrás, o exemplo do coeficiente de auto-difusão. Simultaneamente, tornou-se possível executar simulações por dinâmica molecular de não-equilíbrio [33, 39] introduzindo um gradiente que induza uma corrente apropriada de momento ou de energia. Os coeficientes de transporte podem, então, ser medidos

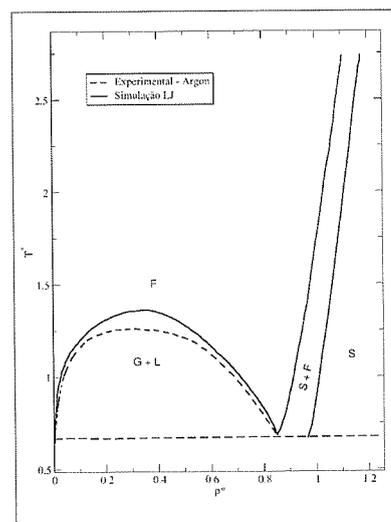


figura 5 Diagrama de fases do Lennard-Jonesium (adaptado de [30]).

directamente como a razão entre a corrente e o gradiente.

Os últimos cinquenta anos viram um enorme incremento na complexidade e natureza dos sistemas simulados. É claro que tem sido necessário desenvolver e refinar os algoritmos de simulação, mas a sua habilidade de previsão radica-se mais directamente no significativo crescimento de poder computacional ao longo desse período.

Como sabemos, as primeiras simulações em mecânica estatística foram realizadas em Los Alamos no famoso MANIAC. Uma máquina desse tipo pesava cerca de 30 toneladas e continha mais do que 18000 tubos de vácuo e 6000 interruptores, ocupando uma sala gigantesca. Podia executar 400 a 1000 operações de vírgula flutuante por segundo (flops). No início de 1970, o famoso CDC 7600 tinha uma velocidade de 40 megaflops. Os tubos de vácuo tinham sido substituídos por transistores. No final de 1970, nasceu o elegante CRAY 1. A sua velocidade de relógio de 12.5 ns, obtida através da tecnologia de circuitos integrados, permitia um pico de desempenho da ordem de 170 megaflops. Este desempenho era sustentado pela vectorização ou "pipe-lining" de instruções.

Os anos 90 viram a introdução de máquinas massivamente paralelas com memórias partilhadas ou distribuídas, e a divulgação de pacotes de programas

de utilização geral, comerciais ou acadêmicos, como por exemplo o DL\_POLY [40]. Um representante dessas máquinas, o CRAY T3D, com 256 processadores DEC-alpha trabalhando em paralelo, produzia um pico da ordem dos 40 gigaflops. O desenvolvimento e construção de novos supercomputadores continua na ordem do dia e a velocidade dos teraflop já foi atingida [41]. Apesar disso, com o extraordinário desenvolvimento actual dos "clusters" de PC's e estações pessoais, *software* e *hardware* de intercomunicação e aumento da capacidade das memórias, podem também atingir-se velocidades da ordem dos teraflops com custos relativamente baixos. Tal tem contribuído para uma verdadeira revolução na Química Computacional, da qual a simulação em mecânica estatística (ou simulação molecular) é parte integrante.

Relativamente às estratégias de programação, a grande parte dos códigos para simulação molecular estão implementados em Fortran, a linguagem-mãe do cálculo numérico, cujas últimas versões têm meios poderosos de estruturação e paralelização. Recentemente, a *programação estruturada*, isto é, a decomposição de um problema em algoritmos (codificados na sua maioria em Fortran ou C) constituídos por interfaces com funções e subrotinas, tem evoluído para a *programação orientada por objectos (OOP)*. Esta estratégia tem consideráveis benefícios para a simulação molecular, em termos do desenho, simplificação e reutilização dos códigos [35], especialmente na resolução de problemas complexos. As linguagens mais adequadas para OOP são C++ , Java ou Visual Basic, embora as últimas versões do Fortran tenham também implementados alguns dos seus recursos.

Os métodos de Monte Carlo e de dinâmica molecular descritos até aqui pressupõem posições e velocidades moleculares bem definidas. Isto pode parecer paradoxal, uma vez que o princípio da incerteza de Heisenberg é universalmente válido, em particular às escalas atômica e electrónica. Porém, para graus de liberdade translacionais o limite clássico é adequado quando o comprimento de onda de de Broglie de uma

molécula seja bastante menor do que a distância média entre moléculas vizinhas, o que sucede para a maioria dos sistemas em condições termodinâmicas normais, excepto para o hidrogénio e hélio a temperaturas muito baixas. Quanto aos graus de liberdade rotacionais, a aproximação clássica é também adequada quando o espaçamento entre os níveis de energia seja menor do que  $kT$  e as moléculas estejam, na sua maioria, no estado vibracional fundamental. Pelo contrário, a vibração molecular é, essencialmente, um fenómeno quântico e, em geral, exige métodos de simulação quânticos [13, 42]. Em primeira aproximação, todavia, a vibração molecular pode ser tratada classicamente pela introdução de potenciais harmónicos entre os átomos e a integração das correspondentes equações de Newton. É uma prática usual nos cálculos de *mecânica molecular* ou *minimização de energia* [34]. De qualquer modo, sublinhe-se que mesmo na mecânica estatística clássica as limitações do princípio da incerteza de Heisenberg são aproximadamente consideradas, através da discretização do espaço fásico numa quantidade numerável de hipervolumes como referimos na secção 2.

Em resumo, o uso dos computadores em Química permite resolver a equação de Schrödinger com vários níveis de aproximação e obter previsões detalhadas das propriedades de átomos, moléculas e microagregados. A determinação dos níveis de energia moleculares e de funções de correlação adequadas racionalizam a espectroscopia experimental. As técnicas de mecânica molecular, e as simulações por Monte Carlo e dinâmica molecular, usando campos de força cada vez mais rigorosos, desempenham uma papel essencial na previsão das propriedades de fases condensadas como, por exemplo, líquidos, cristais líquidos, polímeros, surfactantes, materiais supercondutores, diagramas de fase e sistemas bioquímicos. A combinação da teoria do funcional da densidade (DFT) com os métodos de dinâmica molecular *ab-initio* de Car-Parinello [43, 44] permite a simulação de sistemas onde os graus de liberdade electrónicos e nucleares não estão fortemente acoplados como, por exemplo,

nas reacções químicas. Adicionalmente, cálculos detalhados sobre a difusão molecular conduzem à previsão das velocidades de reacções em fase gasosa.

Não queremos deixar de reforçar o que dissémos anteriormente sobre a capacidade de descoberta da simulação computacional e o seu contributo para o esclarecimento dos mecanismos moleculares, mencionando um exemplo recente sobre a interpretação correcta dos resultados experimentais da difracção de neutrões para a água [45]. Postorino et al. [46] apresentaram resultados experimentais para a água supercrítica que indicavam a ausência de pontes de hidrogénio, em contradição com os estudos de simulação molecular que previam a existência dessas pontes. Concluíram, então, que os modelos da água usados na simulação eram inadequados. Porém, simulações moleculares posteriores de Chialvo e Cummings [47], usando modelos refinados para a água, continuaram a prever pontes de hidrogénio. Em sequência, Soper et al. [48] mostraram que os dados experimentais originais estavam incorrectamente analisados e que as pontes de hidrogénio existem efectivamente de acordo com as previsões da simulação. A simulação molecular também é cada vez mais utilizada para resolver conflictos entre resultados para propriedades de difícil medição experimental como, por exemplo, as densidades críticas de alcanos de elevada massa molecular e termodinamicamente instáveis [49].

Por último, deve referir-se a grande importância da simulação computacional no teste de teorias analíticas moleculares. Estas teorias pressupõem diferentes níveis de aproximações matemáticas e têm como *input* fundamental, tal como nos métodos de simulação molecular, um modelo para o potencial intermolecular. Ao comparar os resultados teóricos com os experimentais, se eles não concordarem, a causa do insucesso é ambígua, pois pode ser devida a duas fontes: às aproximações matemáticas ou ao facto do modelo do potencial não ser realístico. Ora a simulação molecular produz resultados exactos (aparte os inevitáveis erros de arredondamento computacionais) para qualquer modelo

de potencial, independentemente de ser real ou não. Assim, se os resultados teóricos forem comparados com os da simulação a ambiguidade desaparece.

### 5.3.1. Duas aplicações em Electroquímica

Embora no nosso grupo de investigação tenhamos aplicado a simulação molecular a diferentes sistemas e processos, aprez-nos referir uma dos nossos trabalhos mais recentes, e em progresso, na área da Electroquímica. Por três motivos. Primeiro, porque se trata de sistemas heterogéneos com uma apreciável complexidade e relevância prática. Segundo, porque é um exemplo da interacção entre os chamados grupos teóricos e experimentais. Por último, mas não de menor importância, porque mostra como modelos semelhantes podem servir para simular sistemas diferentes.

O projecto é desenvolvido em colaboração com dois grupos experimentais de Electroquímica Interfacial: um, liderado por Luísa Abrantes do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; o outro, liderado por Artur Motheo do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo, Brasil. Ambos os projectos incluem alunos de doutoramento.

Os problemas em estudo são, sucintamente, os seguintes:

- Automontagem de alcanotióis em eléctrodos de ouro, a partir de uma solução em etanol. Pretende-se esclarecer o mecanismo do fenómeno desde a adsorção física das moléculas até à sua reacção com o ouro. A automontagem permite a modificação química dos eléctrodos com diversas aplicações como, por exemplo, o desenvolvimento de biosensores.
- Adsorção do fenol, e derivados, em eléctrodos de ouro, a partir de uma solução aquosa. Pretende-se esclarecer o mecanismo do fenómeno com vista à electrooxidação das moléculas e aplicações a problemas de poluição química.

Realizámos simulações por Monte Carlo usando modelos semelhantes para ambos os sistemas, aparte os campos

de força diferentes. Os detalhes do modelo e dos cálculos encontram-se nas referências [50, 51]. Nas figuras 6 e 7 representam-se configurações dos sistemas durante as simulações. O modelo utilizado é o mais simples e plausível possível, mas os resultados estão em boa concordância com a experiência. Por exemplo, o ângulo de inclinação médio do 1-decanotiol previsto na simulação é de  $22 \pm 8^\circ$  e o experimental  $\sim 30^\circ$ . Relativamente ao fenol, prevê-se que, em soluções diluídas, a molécula se aproxima do eléctrodo numa orientação quase perpendicular. Posteriormente, reorienta-se e adquire uma configuração horizontal o que também concorda com resultados experimentais. Uma vez estabelecida a plausibilidade do modelo, o seu refinamento está em progresso com a inclusão de outras características estruturais e a determinação rigorosa dos campos de força por métodos quânticos *ab-initio*.

## 6. A situação do domínio em Portugal

A investigação em Portugal, com base na simulação computacional em mecânica estatística, acompanhou os progressos internacionais pelo menos desde o fim da década de 1960. A tese de doutoramento de Jorge Calado [52], Professor do IST, realizado em 1969 na Universidade de Oxford, UK, inclui uma secção sobre simulações preliminares, por Monte Carlo, de misturas de cripton+xenon e de metano+cripton como complemento do seu trabalho experimental. Na sequência do seu doutoramento, Jorge Calado introduziu, em 1970, os fundamentos dos métodos de simulação no capítulo sobre Propriedades de Gases e Líquidos da disciplina de Complementos de Química, 5.º ano da Licenciatura em Engenharia Química. Simultaneamente, ele teve a intenção de implementar a investigação neste domínio, estimulando alguns colaboradores, entre eles, José António Cotovio. O autor deste artigo recorda-se de ter encontrado José Cotovio num simpósio sobre simulação realizado, em 1975, na Universidade de Oxford [53]. Cotovio, infelizmente, faleceu, mas a inten-

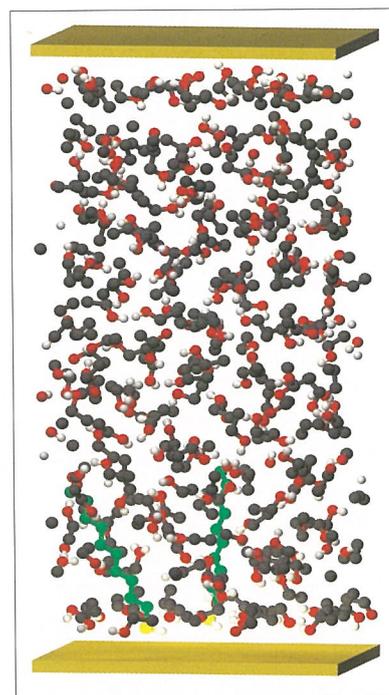
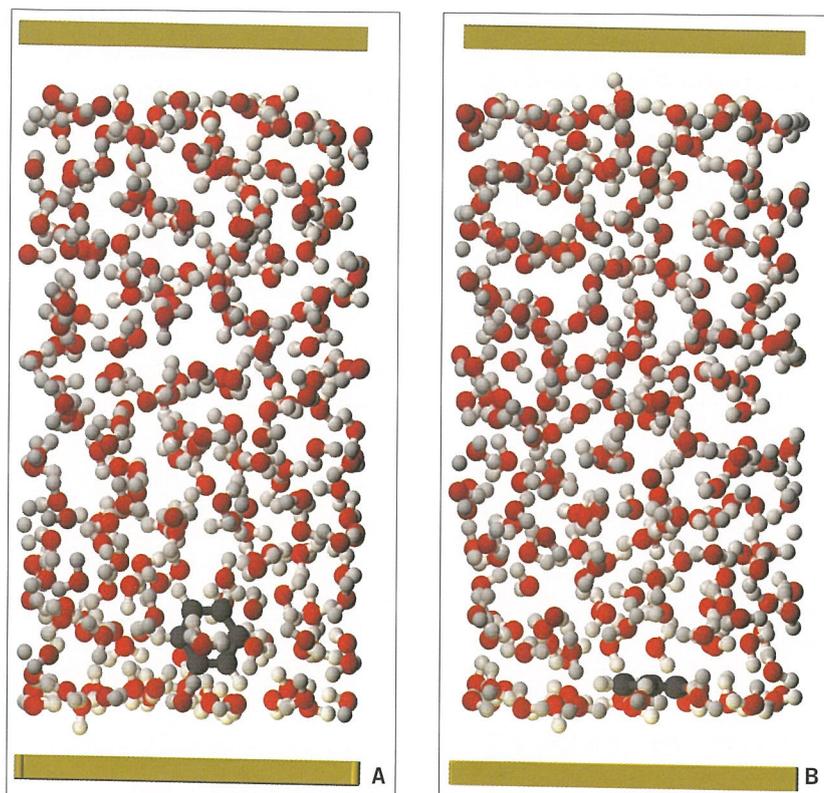


figura 6. Automontagem do 1-decanotiol (em solução de etanol) em eléctrodos de ouro (adaptado de [50])

ção de Jorge Calado concretizou-se posteriormente. Contudo, o primeiro artigo português de revisão sobre o método de Monte Carlo foi, tanto quanto sabemos, publicado em 1972, da autoria de Nieto de Castro, Nunes da Ponte e Meira Soares [54], discípulos de Jorge Calado e, na época, elementos do seu grupo.

O autor deste artigo iniciou o trabalho de doutoramento em 1973, na Universidade de Southampton, UK, e terminou-o em 1977 [55]. Pensamos que foi o primeiro doutoramento de um português neste domínio específico, se não, seguramente dos primeiros. Ele foi o responsável pela criação da área de Química Computacional, em 1979, no Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, com a introdução da disciplina de Cálculo Químico no 3.º ano da Licenciatura em Química, de disciplinas de opção na área da simulação e a implementação de várias medidas para o desenvolvimento da investigação.

Presentemente, existem vários grupos de investigação em Portugal aplicando e desenvolvendo métodos de simulação molecular nomeadamente, e tanto quanto é do nosso conhecimento, nas Uni-



**figura 7** Adsorção do fenol (em solução aquosa) em eléctrodos de ouro: **a)** aproximação ao eléctrodo; **b)** posterior reorientação (adaptado de [51])

versidades de Aveiro, Coimbra, Évora, Lisboa, Nova de Lisboa e Porto bem como no IST, ITQB e BIAL. A sua actividade é substancial a nível de publicações originais, doutoramentos, mestrados, cursos de licenciatura e aplicações com viabilidade económico-industrial.

Trata-se de um domínio com consideráveis perspectivas em que Portugal poderá ter um papel relevante. De facto, as infraestruturas necessárias são as humanas e as computacionais. Quanto às primeiras existem com abundância. Relativamente às segundas, tendo em conta a constante descida dos custos do material informático e o aumento do seu desempenho, parece não haver uma actuação correcta e consequente. Diremos, até, que existe um equívoco. Na verdade, com o desenvolvimento espectacular dos PC's e estações pessoais radicou-se em Portugal, a partir do meio da última década, a ideia de que as exigências dos investigadores que pugnam por meios de cálculo com alto desempenho estavam definitivamente resolvidas, através da concessão de financiamento para alguns PC's ou estações. Aparentemente com essa ideia, por exemplo, a Fundação para o Desenvolvimento dos Meios de Cálculo Científico Nacional (FCCN), criada no fim da década de

1980, alterou o seu objectivo original para investir quase exclusivamente nas redes de comunicação. Os grupos de investigação fecharam-se sobre si próprios no que se refere a recursos computacionais. Passaram a equipar-se o melhor que podem recorrendo a projectos de investigação sobre os quais não há garantia de continuidade, pelo menos a médio prazo. Acentuou-se a desigualdade de oportunidades entre os investigadores verdadeiramente interessados na aplicação e desenvolvimento da simulação molecular.

É claro que não pomos qualquer dúvida sobre a importância das redes de comunicação, *internet*, correio electrónico e afins. São, obviamente, o timbre deste século, das "auto-estradas" da informação e da globalização, bem como um auxílio imprescindível na investigação científica. Mas tão somente isso, um auxílio na hierarquia das componentes imprescindíveis para a investigação científica.

Das alternativas actuais para os recursos computacionais, necessários para uma excelente investigação e desenvolvimento em Portugal no domínio da simulação molecular, não é difícil encontrar soluções com custos baixos e totalmente suportáveis quando compa-

rados com as exigências de outras áreas de investigação. Acreditamos que uma boa coordenação da optimização dos custos e dos recursos computacionais distribuídos pelas universidades, institutos e centros de investigação nacionais, de modo a garantir uma continuidade e actualização constantes, e um acesso com igualdade de oportunidades para todos os investigadores, contribuiria para que Portugal adquirisse uma relevância internacional cada vez maior neste domínio.

Terminamos esta digressão sobre a simulação computacional em mecânica estatística, e os imprescindíveis instrumentos laboratoriais designados por computadores, com uma declaração de John F. Kennedy, em 1963, o ano da sua morte trágica:

"Man is still the most extraordinary computer of all"

Não sabemos exactamente onde e em que circunstâncias Kennedy, um dos estadistas que estimulou significativamente a ciência e a tecnologia, proferiu esta declaração. Cremos que a mensagem continua actual e perdurará por tempos incomensuráveis, a despeito das realizações espectaculares da Robótica e das convicções do núcleo-duro da Inteligên-

cia Artificial. Curiosamente, essa mensagem está inscrita numa camisola desportiva oferecida durante um dos "IBM Europe Institutes" sobre simulação computacional [56-58], realizados na última década na Áustria e para os quais o autor deste artigo teve a honra de ser convidado.

#### Agradecimentos

O autor agradece reconhecidamente ao Professor Jorge Calado a simpatia e a prontidão dos seus esclarecimentos, ao Dr. Rui Fartaria a cuidadosa preparação das figuras e ao avaliador deste artigo as valiosas sugestões.

#### Referências

- [1] F.M.S.S. Fernandes, *Química, Bol. Soc. Port. Quím.*, **90**, 39 (2003).
- [2] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087 (1953).
- [3] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *J. Chem. Phys.*, **27**, 1208 (1957).
- [4] W.W. Wood, J.D. Jacobson, *J. Chem. Phys.*, **27**, 1207 (1957).
- [5] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *J. Chem. Phys.*, **31**, 459 (1959).
- [6] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *J. Chem. Phys.*, **33**, 1439 (1960).
- [7] *Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi"*, editors: G. Ciccotti, W.G. Hoover, North-Holland, 1986.
- [8] P.S. Laplace, *Essai Philosophique sur les Probabilités*, Courcier, Paris, 1814.
- [9] F. Capra, *O Tao da Física*, Editorial Presença, 1983.
- [10] H. Gould, J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems*, Addison-Wesley, Reading, 1988.
- [11] D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press, 1987.
- [12] K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, 2ª Edição, Springer, Berlim, 1986.
- [13] M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [14] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*, 2ª Edição, Academic Press, 2002.
- [15] P.C.R. Rodrigues, F.M.S.S. Fernandes, *Int. J. Quantum Chem.*, **84**, 375 (2001).
- [16] J.L. Lebowitz, O. Penrose, *Physics Today*, **26**, 23 (1973).
- [17] A.J.C. Varandas, *Bol. Soc. Port. Quím.*, **22** (Série II), 25 (1985).
- [18] W.G. Hoover, F.H. Ree, *J. Chem. Phys.*, **49**, 3609 (1968).
- [19] D. Chandler, J.D. Weeks, H. Andersen, *Science*, **220**, 787 (1983).
- [20] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *Phys. Rev. A*, **1**, 76 (1970).
- [21] H.E.A. Huiterna, J.P. van der Eerden, *J. Chem. Phys.*, **110**, 3267 (1999).
- [22] J.E. Lennard-Jones, *Proc. Roy. Soc.*, **A106**, 441, 463 (1924).
- [23] W.W. Wood, F.R. Parker, *J. Chem. Phys.*, **27**, 720, (1957).
- [24] A. Rahman, *Phys. Rev.*, **136**, A405 (1964).
- [25] A. Rahman, *J. Chem. Phys.*, **45**, 2585 (1966).
- [26] L. Verlet, *Phys. Rev.*, **159**, 98 (1967).
- [27] L. Verlet, *Phys. Rev.*, **165**, 201 (1968).
- [28] D. Levesque, L. Verlet, *Phys. Rev. A*, **2**, 2514 (1970).
- [29] D. Levesque, L. Verlet, J. Kürkijarvi, *Phys. Rev. A*, **7**, 1690 (1973).
- [30] J.P. Hansen, L. Verlet, *Phys. Rev.*, **184**, 151 (1969).
- [31] I.R. McDonald, K. Singer, *Mol. Phys.*, **23**, 29 (1972).
- [32] J.B. Gibson, A.N. Goland, M. Milgram, G.H. Vineyard, *J. Chem. Phys.*, **120**, 1229 (1960).
- [33] *Simulation of Liquids and Solids*, editors: G. Ciccotti, D. Frenkel, I.R. McDonald, North-Holland, 1987.
- [34] A.R. Leach, *Molecular Modelling. Principles and Applications*, 2ª Edição, Prentice Hall, Londres, 2001.
- [35] R.J. Sadus, *Molecular Simulation of Fluids. Theory, Algorithms and Object-Oriented*, Elsevier, Amsterdão, 2002.
- [36] F.M.S.S. Fernandes, *Rev. Ciência, Série VII*, **2**, 31 (2001).
- [37] F.M.S.S. Fernandes, J.P.P. Ramalho, *Comput. Phys. Commun.*, **90**, 73 (1995).
- [38] L.V. Woodcock, *Chem. Phys. Lett.*, **10**, 257 (1971).
- [39] J.P. Hansen, I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, 2ª Edição, Academic Press, Londres, 1986.
- [40] D.W. Forrester, W. Smith, *DL-POLY*, CCLRC, Daresbury Lab., Daresbury, UK.
- [41] P. Querido, *Espanha Constrói Supermáquina*, Revista Única (Jornal Expresso), pág. 96, Março 6, 2004.
- [42] F.M.S.S. Fernandes, P.C.R. Rodrigues, *Port. Electrochim. Acta*, **17**, 61 (1999).
- [43] R. Car, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2471 (1985).
- [44] D.J. Tildesley, *Faraday Discuss.*, **100**, C29 (1995).
- [45] A.A. Chialvo, P.T. Cummings, J.M. Simonson, R.E. Mesmer, H.D. Cochran, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **37**, 3921 (1998).
- [46] P. Postorino, R.H. Tromp, M.A. Ricci, A.K. Soper, G.H. Neilson, *Nature*, **366**, 668 (1993).
- [47] A.A. Chialvo, P.T. Cummings, *J. Chem. Phys.*, **101**, 4466 (1994).
- [48] A.K. Soper, F. Bruni, M.A. Ricci, *J. Chem. Phys.*, **106**, 247 (1997).
- [49] J.I. Siepmann, S. Karaborni, B. Smit, *Nature*, **365**, 330 (1993).
- [50] R.P.S. Fartaria, F.F.M. Freitas, F.M.S.S. Fernandes, *Chemistry Preprint Server, CPS: physchem/0311001* (2003).
- [51] R.S. Neves, A.J. Motheo, F.M.S.S. Fernandes, R.P.S. Fartaria, *J. Braz. Chem. Soc.*, **15**, 224 (2004).
- [52] J. Calado, *Thermodynamic Studies of Condensed Gas Mixtures*, Ph.D. Thesis, December 1969, University of Oxford, UK.
- [53] *Symposium on Computational Physics of Liquids and Solids*, SRC Atlas Symposium nº 5, University of Oxford, 1975.
- [54] C.A.N. de Castro, M.N. da Ponte, V.A.M. Soares, *Técnica*, **417**, 101 (1972).
- [55] F.M.S.S. Fernandes, *Computer Simulation of Model Systems. Studies of Some Simple Solid and Liquid Systems*, Ph.D. Thesis, October 1977, University of Southampton, UK.
- [56] *Monte Carlo Methods on High-Performance Computers*, IBM Europe Institute, Oberlech, Austria, 1990.
- [57] *Computational Chemistry*, IBM Europe Institute, Oberlech, Austria, 1991.
- [58] *Computer-Aided Chemistry for Molecular Properties and Design*, IBM Europe Institute, Oberlech, Austria, 1992.

# A degradação das rochas do património cultural construído: o caso das rochas carbonatadas.

AMÉLIA DIONÍSIO, LUÍS AIRES-BARROS, MARIA JOÃO BASTO

## Resumo

As rochas são consideradas, pela população em geral, como elementos duros, inertes e duradouros. Todavia as suas características podem vir a modificar-se como resultado da adaptação a um ambiente diferente daquele em que foram geradas.

Sendo a pedra o material de construção de utilização mais generalizada ao longo dos vários períodos da História, torna-se importante saber quais os fenómenos de alteração que incidem sobre as rochas de determinado monumento, com o propósito de encontrar as suas cau-

sas bem como propor, sempre que possível, soluções que procurem minimizar os efeitos nefastos observados e tentar prever a sua evolução futura ou seja indicar medidas de conservação e manutenção.

As consequências do decaimento das rochas aplicadas em património cultural construído têm inevitavelmente impactos económicos negativos, seja pela impossibilidade de fruição, seja pela necessidade de aplicação de medidas correctivas.

Referem-se alguns dos mecanismos químicos e formas de decaimento típicos ocorrentes em materiais pétreos de natureza calcária.

## 1. Introdução

As rochas são sistemas físico-químicos polifásicos constituídos por fases sólidas e fluidas. A fase sólida é composta por minerais, existindo entre eles inúmeras descontinuidades (poros e fissuras) através das quais há possibilidade de circulação de fluidos (líquidos e gases). Atenção especial é dada ao meio poroso destes materiais uma vez que a capacidade de retenção (porosidade) e de movimentação de fluidos (permeabilidade) no seu interior depende do volume e geometria dos vazios.

As rochas interactuam com o ambiente em que se encontram e transformam-se de acordo com as solicitações a que estão sujeitas.

No conjunto dos materiais utilizados em património cultural construído, a pedra é o que apresenta aplicação mais generalizada ao longo dos vários períodos da História, podendo mesmo considerar-se

um material de tradição milenar. Recordem-se, por exemplo, os conjuntos megalíticos, as catedrais medievais, os edifícios renascentistas ou barrocos entre outros.

As rochas aplicadas nestas construções correspondem, na sua maioria, a materiais locais, ou seja, a rochas aflorantes nas suas imediações. Todavia houve desde a Antiguidade preocupação com a sua escolha de forma a respeitar não só critérios estéticos como também critérios de durabilidade.

Apesar da diversidade de materiais pétreos ocorrentes na litosfera, ao nível do património cultural construído, destacam-se os granitos (*sensus lato*), rocha de composição silicatada e as rochas carbonatadas sedimentares e metamórficas (calcários e mármore). Trata-se de materiais que apresentam diferentes características intrínsecas decorrentes do processo genético, conduzindo necessariamente a diferentes respostas

face a solicitações externas quando aplicadas ou expostas ao meio envolvente.

O decaimento das rochas aplicadas em património cultural construído pode ser entendido como a tentativa de adaptação a um ambiente diferente daquele a que se encontravam sujeitas na sua jazida. Não é um fenómeno novo, tendo sido evidente para diversos observadores ao longo dos séculos. Referências várias foram efectuadas por escritores gregos e romanos sobre a necessidade de intervenção nos processos de deterioração. Todavia, nas últimas décadas, o processo de decaimento tem-se vindo a acentuar, devido sobretudo à presença na atmosfera de concentrações anómalas de diversos tipos de contaminantes.

As consequências do decaimento das rochas aplicadas em património cultural construído têm inevitavelmente impactos económicos negativos, seja pela impossibilidade de fruição, seja pela ne-

cessidade de aplicação de medidas correctivas.

As rochas dos monumentos podem sofrer três tipos de decaimento, que se encontram, na maior parte dos casos, de tal modo interligados, que se torna extremamente difícil distinguir qual deles terá tido acção principal. São eles:

- Decaimento químico que resulta de reacções químicas que ocorrem à superfície e nas descontinuidades das rochas, originando minerais secundários;
- Decaimento físico que resulta de fenómenos de expansão e/ou retracção provocados por variações térmicas, abalos sísmicos e ainda por expansão devido à génese de minerais secundários por recristalização;
- Decaimento biológico que é provocado não só pelo crescimento nas rochas de microorganismos, como ainda pela acção dos pombos e do vandalismo humano.

Em geral os seus efeitos somam-se, convergem e as suas causas entrecruzam-se. Os fenómenos de carácter químico podem ter consequências físicas, uma transformação física pode conduzir a determinadas reacções químicas e as acções biológicas repercutem-se em modificações físicas e químicas.

Para a ocorrência destes fenómenos de decaimento concorrem factores como as características próprias dos materiais, a orientação geográfica ao regime pluviométrico, eólico e de insolação do monumento ou de parte relevante, a sua função ao longo da História assim como, em muitos casos, o vandalismo e a incultura das pessoas.

## 2. Mecanismos e formas de decaimento das rochas

Formas de decaimento ou patologias da pedra podem definir-se como sendo as modificações da sua morfologia, decorrentes de processos de alteração desencadeados por factores ambientais, pelo uso de materiais incompatíveis, por acções de manutenção inadequadas, por medidas de conservação inapropriadas ou por actos de vandalismo. As patolo-

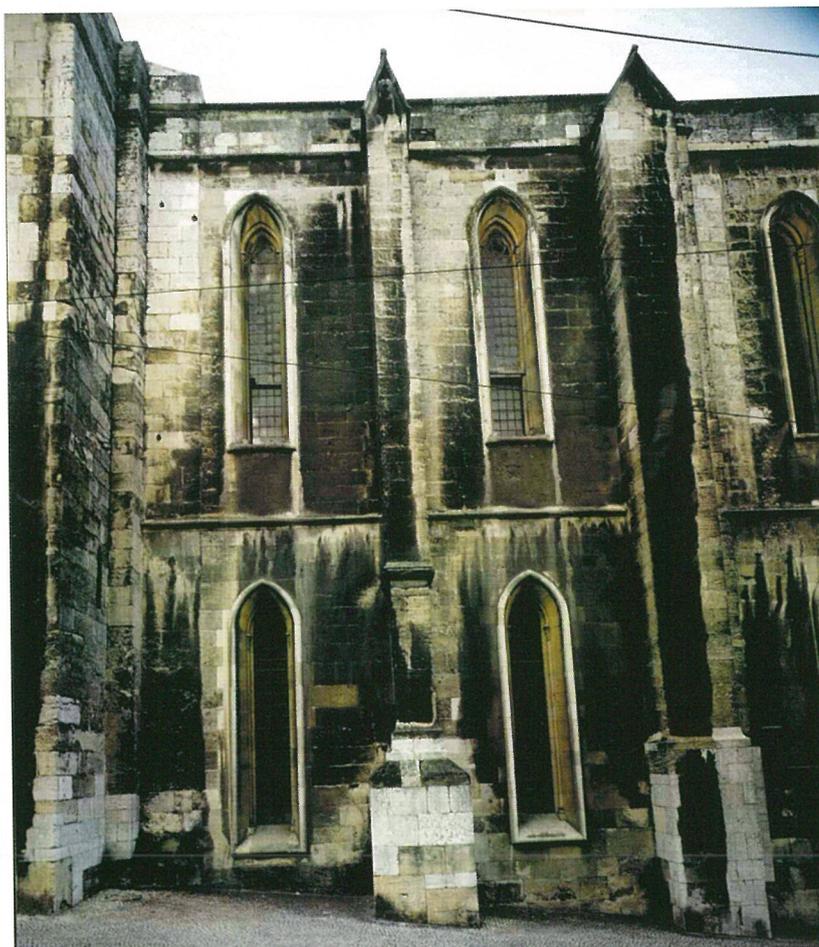


figura 1 Sé de Lisboa. Desenvolvimento de crostas negras gipsíferas.

gias podem não só ser de diferentes tipos como também apresentar diferente extensão e grau de severidade (intensidade de decaimento).

Dando como exemplo o caso das rochas calcárias procurar-se-á ilustrar alguns dos mecanismos químicos e formas de decaimento características deste tipo de material pétreo.

### 2.1 Acção dos contaminantes atmosféricos

Contaminantes atmosféricos definem-se como concentrações anómalas de gases e partículas, sobretudo o dióxido de enxofre, os óxidos de azoto, as cinzas volantes carbonosas e as partículas metálicas, libertados por processos de combustão como as centrais de produção de energia, sistemas de aquecimento doméstico, o tráfego urbano e as actividades industriais. Estes podem depositar-se directamente nas superfícies

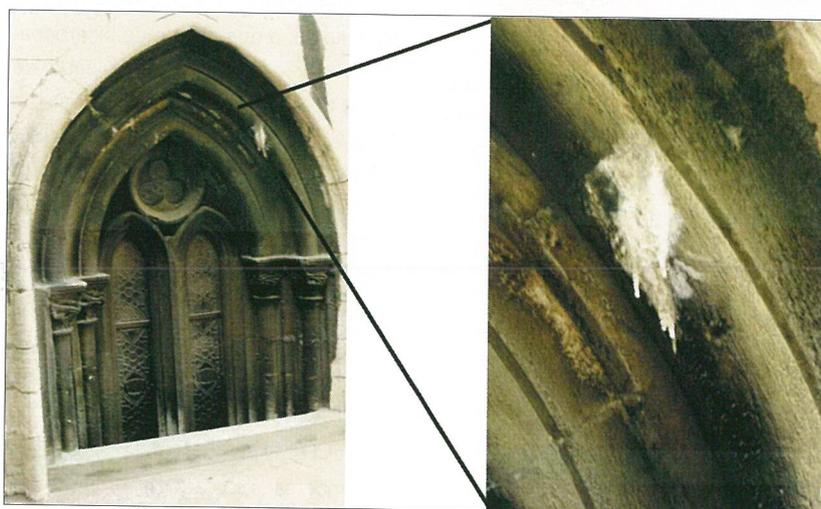
ou interagir com as mesmas sob a forma de chuvas ou nevoeiros ácidos, após passagem pelo ciclo da água.

Os estudos até agora efectuados permitem concluir que a sulfatação das superfícies calcárias é prelúdio de decaimento profundo. A sulfatação é o resultado da oxidação lenta do dióxido de enxofre em ácido sulfúrico e subsequente neutralização deste último pelos constituintes básicos do material pétreo ( $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{MgCO}_3$ , silicatos de cálcio, etc.).

A oxidação do  $\text{SO}_2$  é promovida pela reacção com diferentes oxidantes activos. Entre estes destacam-se o dióxido de azoto, ozono, oxigénio activado pela existência de um nível de humidade bastante elevado, óxidos metálicos (V, Zn, Ni, etc.) presentes no particulado atmosférico e as cinzas volantes carbonosas emitidas pelas centrais de produção de energia ou presentes na exaus-



**figura 2** – Mosteiro de Santa Clara-a-Velha (Coimbra). Crostas negras "fósseis" nos capitéis e colunas do claustro que permaneceu soterrado durante séculos.



**figura 3** Fachada Norte da Sé de Lisboa. Depósitos estalactíticos resultantes da recrystalização de calcite.

tão dos motores a gasóleo em áreas urbanas poluídas.

O decaimento das rochas calcárias por acção do dióxido de enxofre é um processo complexo e interactivo, conhecendo-se o produto inicial – a rocha calcária e o produto final – o gesso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ).

Como resultado da sulfatação observa-se a formação de crostas gipsíferas, em geral de tonalidade negra (decorrente da acumulação de partículas atmosféricas), em áreas abrigadas da lavagem contínua pelas águas da chuva (figura 1). Nos locais constantemente lavados pelas águas pluviais a rocha mantém a sua cor original, uma vez que o gesso formado é removido, dada a sua solubilidade, no episódio pluviométrico seguinte.

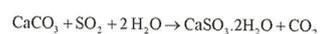
Comparando quer o volume molar quer a solubilidade do mineral neoformado – gesso e do mineral inicial – calcite, verifica-se que o volume molar do primeiro é quase duplo do da calcite ( $60 \text{ cm}^3/\text{mol}$  e  $37,7 \text{ cm}^3/\text{mol}$ ), pelo que as crostas gipsíferas têm tendência a "explodir", expondo novas superfícies de calcite a novas deposições de gesso. Relativamente à solubilidade do gesso ( $2080 \text{ mg/l}$ ), ela é quarenta vezes superior à da calcite ( $50 \text{ mg/l}$ ), pelo que nas zonas de lavagem, o gesso formado é facilmente removido nos períodos pluviométricos posteriores.

A interacção rocha- $\text{SO}_2$  processa-se ou por deposição via seca ou por via húmida.

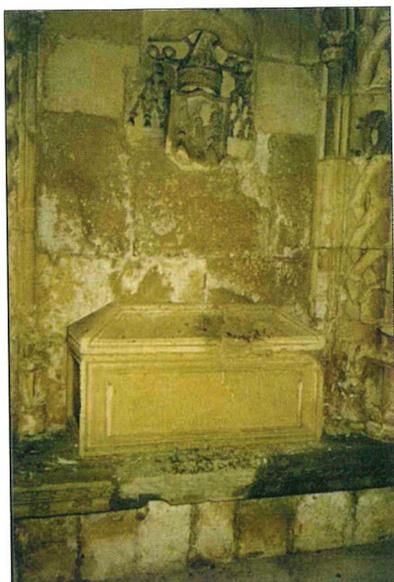
Independentemente do poluente considerado, nem todas as superfícies externas de determinado monumento são afectadas por ambos os processos de

deposição. Em todas é possível o processo de deposição a seco, mas apenas aquelas que apresentam determinada orientação ou forma são afectadas pelo processo de deposição via húmida.

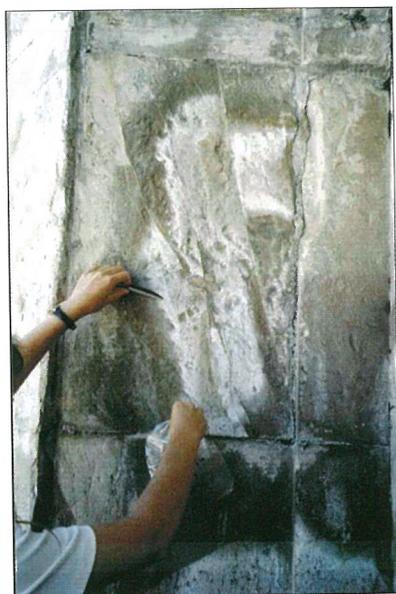
Quando o  $\text{SO}_2$  atinge a superfície pétreo calcária, por deposição a seco e em condições de baixos valores de humidade relativa do ar é formado em primeiro lugar sulfito de cálcio:



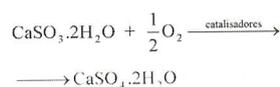
Este composto poderá, por sua vez, passar a sulfato de cálcio (caso a água não esteja totalmente ausente) por um processo de oxidação por intermédio do oxigénio e em presença de substâncias catalisadoras ( $\text{NO}_2$ , partículas carbonosas, óxidos metálicos):



**figura 4** Túmulo de D. Pedro Gavião no Mosteiro de Santa Cruz em Coimbra. São visíveis as eflorescências salinas resultantes de fenômenos de ascensão de água por capilaridade.

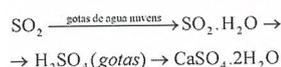


**figura 5** Varandim da Porta Especiosa da Sé-Velha de Coimbra. Desenvolvimento de eflorescências salinas em locais abrigados constituídas essencialmente por epsomite ( $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ ), relacionadas com a infiltração e percolação de águas pluviais.



O mecanismo de deposição via húmida do  $SO_2$ , pode também ocorrer de duas formas distintas: oxidação heterogénea do  $SO_2$  em fase aquosa ou oxidação homogénea do  $SO_2$  a sulfato na troposfera.

O processo de oxidação heterogénea do  $SO_2$  em fase aquosa é, provavelmente, o processo mais importante na formação de sulfatos e conseqüentemente na deterioração dos materiais pétreos calcários. Esta oxidação pode ocorrer quer na atmosfera, quer sobre a superfície pétreo. O ácido sulfúrico é, no primeiro caso, formado na atmosfera, podendo atingir a superfície em questão sob a forma de gotas:



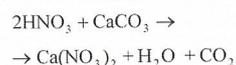
No segundo caso o ácido sulfúrico é formado sobre a própria superfície pétreo na presença de um filme líquido. Em ambas as situações é de considerar a actuação de agentes catalisadores.

Nem sempre estas crostas de tonalidade negra derivam da interacção do material calcário com contaminantes atmosféricos. Por exemplo no caso do Mosteiro de Santa Clara-a-Velha em Coimbra, as crostas formadas, apesar de apresentarem tonalidade acastanhada (figura 2), são desprovidas de elementos denunciadores da alteração antropogénica e segundo AIREs-BARROS *et al.* (1998) a presença de Fe e Mn (que explica a coloração que apresentam) deve-se à deposição de hidróxidos e/ou óxidos de ferro e manganês promovida pelos aluviões que soterraram o monumento durante vários séculos.

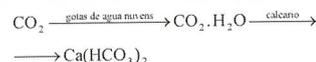
No que se refere ao decaimento promovido pelos óxidos de azoto (principalmente  $NO$  e  $NO_2$ ), este não é facilmente detectado pelo facto de os nitratos, eventualmente formados, apresentarem elevada solubilidade na água (341 g/100 g de água a 25.°C). É possível que este tipo de compostos se forme durante os períodos secos, afectando o material pétreo (devido à diferença de volume molar existente entre o produto de neoformação e o substrato pétreo) e que depois desapareçam no próximo episódio pluviométrico.

O ácido nítrico, formado pela oxidação do  $NO_2$ , tem como principal característica ser um ácido forte com uma taxa de deposição que é relativamente independente da humidade relativa do ar, o que o torna especialmente importante em climas secos e quentes. O ácido nítrico

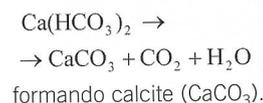
pode reagir com o substrato calcário levando à conversão do carbonato em nitrato de cálcio:



Os efeitos do dióxido de carbono sobre os materiais pétreos calcários, ainda que em menor escala do que os dos poluentes atrás abordados, resultam da possibilidade de formação de um composto – o bicarbonato de cálcio – que apresenta solubilidade cerca de 100 vezes superior à do carbonato de cálcio original. As etapas deste processo podem representar-se do seguinte modo:



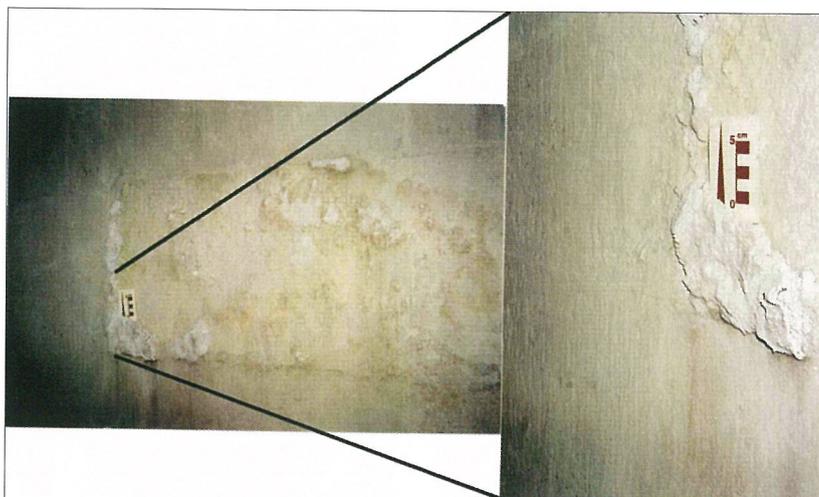
No entanto, a quantidade de bicarbonato de cálcio dissolvida pela água da chuva depende da sua temperatura e da pressão parcial do  $CO_2$  no ar. Este fenómeno é tanto mais intenso quanto mais a temperatura se aproximar de 0°C. Todavia o próprio bicarbonato de cálcio dissolvido na água da chuva poderá, caso a temperatura do ar aumente, vir a recristalizar sobre as superfícies pétreas, de acordo com a reacção:



Sucedem todavia que a porosidade associada a esta fase calcítica recristalizada é bastante superior à original, encontrando-se deste modo facilitada a circulação de soluções ricas em sais (como cloretos, sulfatos e nitratos) e em substâncias de carácter ácido (figura 3).

## 2.2 Acção das águas

A água pode também constituir um importante factor de decaimento das rochas aplicadas nos monumentos. Trata-se do principal veículo de agressão das rochas e está associado praticamente a todos os processos e tipos de alteração que uma rocha sofre. É um agente polivalente dado as mudanças de estado que pode experimentar. Actua também como veículo de transporte de outras substâncias como sais solúveis, contaminantes atmosféricos e organismos vivos, o que aumenta significativamente o seu papel nos processos de decaimento.



**figura 6** Hospital Termal das Caldas da Rainha. Fenómenos de empolamento das superfícies calcárias associados à cristalização de sais provenientes da condensação/evaporação da água termal.



**figura 7** Mosteiro de Santa Cruz em Coimbra. Colunas corroidas de forma diferencial.

As consequências da acção da água sobre as rochas variam consoante a sua origem: água das formações de fundação (figura 4), água da chuva (figura 5), água de condensação e outros tipos de água v.g. termais (figura 6).

A acção da água, independentemente da sua origem, manifesta-se através de:

- Reacções químicas com o substrato pétreo: reacções de dissolução, hidrólise, hidratação, oxidação-redução, etc.;
- Fenómenos de carácter físico como por exemplo rotura devido às tensões criadas no material pétreo durante os ciclos de cristalização-dissolução e hidratação de sais, ciclos de gelo-degelo da água nos poros e fissuras das rochas e por variação do grau de saturação, etc..

A água transportando sais em solução, do exterior ou que vai acumulando du-

rante a sua movimentação a partir da rocha hospedeira ou de outros materiais presentes, pode ao atingir a superfície ou no interior dos materiais pétreos, evaporar-se e depositar sais, de acordo com o estado termohigrométrico da atmosfera envolvente. Quando a cristalização dos sais é efectuada à superfície da rocha dá-se o nome de eflorescência, e criptoflorescência ou sub-eflorescência no caso de se formar no seu interior.

Estes depósitos salinos não são estáveis, transformam-se com o tempo em função da temperatura e humidade do ar, ou seja o microclima condiciona a actividade dos sais solúveis que precipitam sempre que a água se evapora. Também cristalizam quando a humidade relativa da atmosfera envolvente diminui. Alguns sais dissolvem-se e cristalizam (deliquescência) e mudam o estado de hidratação (higroscopicidade) periodicamente conforme as oscilações da humidade e temperatura do ar.

A cristalização e a hidratação dão-se apenas para valores determinados de humidade relativa do ambiente. Então pode evitar-se o decaimento do material, mantendo a humidade relativa do ambiente acima ou abaixo destes valores críticos. Todavia, a questão não é tão simples como pode parecer à primeira vista porque apenas se conhecem as humidades relativas para os sais puros, sendo mais complexo o comportamento de misturas salinas.

Na Tabela 1 indicam-se, a título exemplificativo, a humidade relativa de equilíbrio para vários sais e na Tabela 2 a humidade relativa de hidratação de alguns sais solúveis.

Verifica-se que muitos dos sais solúveis têm pontos higroscópicos a humidades relativas consideravelmente inferiores a 100%. Isto significa que eles podem tornar-se deliquescentes quando a sua humidade relativa é excedida e cristalizar

**Tabela 1– Humidades relativas de equilíbrio para vários sais a 20°C.**

Sulfato de sódio	92%	Nitrato de sódio	75%	Cloreto de sódio	75%
Sulfato de potássio	98%	Nitrato de potássio	94%	Cloreto de potássio	85%
Sulfato de cálcio	99.96%	Nitrato de cálcio	56%	Cloreto de cálcio	33%
Sulfato de magnésio	90%	Nitrato de magnésio	53%	Cloreto de magnésio	44%
Sulfato de amónio	81%	Nitrato de amónio	66%	Cloreto de amónio	80%

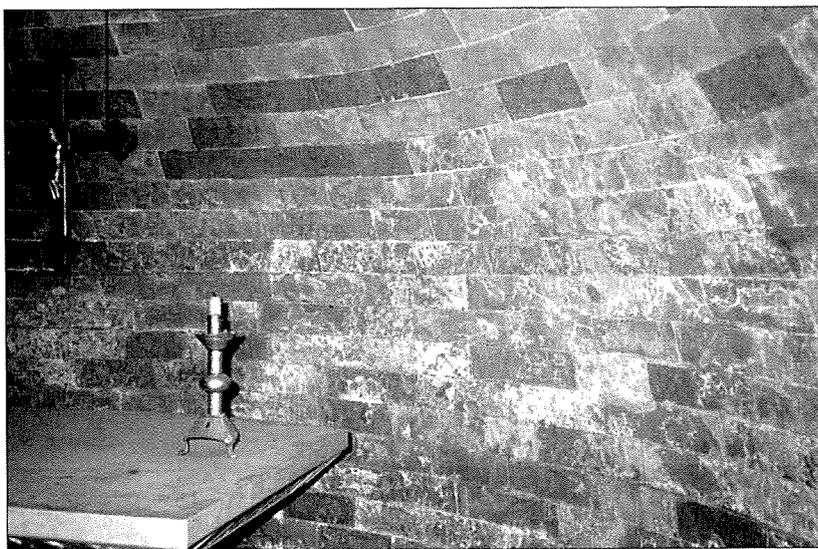


figura 8 Capela funerária de Manuel de Falla na cripta da Catedral de Cadiz (Espanha). Desenvolvimento generalizado de eflorescências salinas.

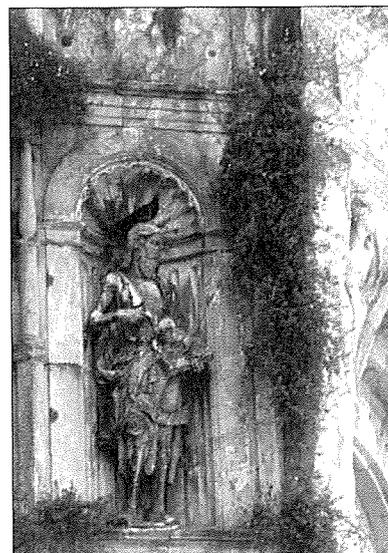


figura 9 Porta Especiosa na Sé Velha de Coimbra. Desenvolvimento de plantas superiores ao longo de juntas de blocos.

quando a sua humidade relativa baixar aquém do ponto crítico.

Estas águas ao percolarem através de outros materiais como é o caso das argamassas e dos elementos metálicos, podem também sofrer alteração da sua composição química, adquirindo características completamente distintas das iniciais. Relativamente a este assunto FIGUEIREDO *et al.* (2001) apresentam um estudo comparativo das águas pluviais antes e após se infiltrarem na Basílica da Estrela (Lisboa) e verificam que as suas composições são quimicamente muito diferentes. As águas de infiltração apresentam-se enriquecidas em  $K^+$ ,  $Na^+$ ,  $Cl^-$  e  $HCO_3^-$ , o que se deve, segundo os autores, à interacção destas águas com os materiais calcários e com as argamassas de juntas. Neste caso, estas soluções salinas explicam o aparecimento de minerais como trona ( $Na_3H(CO_3)_2 \cdot 2H_2O$ ) e thenardite ( $Na_2SO_4$ ) no interior do monumento.

**Tabela 2 – Humidades relativas de hidratação para vários sais a 25.°C.**

$Na_2CO_3 \cdot H_2O \rightarrow Na_2CO_3 \cdot 7H_2O$	48%
$Na_2CO_3 \cdot 7H_2O \rightarrow Na_2CO_3 \cdot 10H_2O$	79%
$Na_2SO_4 \rightarrow Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$	72%

As águas podem igualmente conduzir à perda de material pétreo, quer por dissolução da superfície pétreo, quer por erosão, ou seja, por quebra das ligações físicas entre os grãos dos minerais constituintes das rochas (figura 7).

### 2.3 Acção do aerossol marinho

Em áreas costeiras, ou relativamente próximas do mar, o aerossol atmosférico apresenta na sua composição gotículas de pequena dimensão provenientes da água do mar e de composição salina. Estes sais podem depositar-se directamente sobre as superfícies pétreas (deposição via seca) ou podem ser solubilizados e transportados pelas águas das chuvas, podendo igualmente contactar com essas superfícies (deposição via húmida) e, caso as condições termohigrométricas sejam favoráveis, precipitar no seu interior. Estes sais são essencialmente constituídos por sódio, cloro, magnésio, potássio, cálcio e sulfatos. O sódio e o cloro representam cerca de 86.5%.

O efeito do aerossol marinho depende de dois mecanismos: hidratação e cristalização. Todavia no caso específico dos cloretos, os seus efeitos são mais nocivos nos materiais de construção do que os resultantes de outros sais, uma vez que a sua acção se faz sentir até zonas mais internas.

A deposição de aerossol marinho, não se mantém constante ao longo do ano, isto é, são observadas variações sazonais na taxa de deposição dos principais iões.

Em contraste com os efeitos dos contaminantes atmosféricos antropogénicos, o enriquecimento em sais marinhos nos monumentos históricos é um processo que se vem a verificar desde longa data.

O decaimento decorrente da acção do aerossol marinho é bastante acentuado em monumentos da Bacia Mediterrânica. É exemplo a cripta da Catedral de Cadiz (figura 8) onde as eflorescências salinas são caracterizadas pela presença de gesso, thenardite, mirabilite ( $Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$ ), arcanite ( $K_2SO_4$ ), aptitalite ( $K_3Na(SO_4)_2$ ), trona e termonatrite ( $Na_2CO_3 \cdot H_2O$ ).

### 2.4 Acção dos (Micro)Organismos

Os agentes biológicos são também relevantes nos processos de decaimento dos materiais pétreos, especialmente em ambientes húmidos, em áreas em que se verifica elevada precipitação atmosférica. Nestas condições é facilitado o desenvolvimento de microorganismos e/ou organismos pertencentes a vários grupos sistemáticos como plantas, fungos, algas, bactérias e líquenes. As rochas calcárias são atacadas principal-



figura 10 Mosteiro dos Jerónimos. Amplo desenvolvimento de colonização líquénica.

mente por bactérias sulfatantes e nitrificantes.

Alguns dos seus efeitos sobre as superfícies pétreas são: (i) fracturação mecânica devida à pressão que as raízes de certas plantas superiores exercem ao crescerem nas fendas das rochas (figura 9); (ii) decomposição de alguns dos minerais que compõem as rochas por algumas plantas superiores, dado existirem entre ambas reacções de permuta iónica; (iii) aumento da superfície da rocha exposta ao ataque através da penetração das hifas dos líquenes nas microdescontinuidades dos cristais, conduzindo a fenómenos de desagregação mecânica; (iv) criação de uma barreira retentora da humidade, acentuando a decomposição da rocha e a alteração da permeabilidade a gases e a líquidos. Acresce que estes microorganismos têm ainda a possibilidade de conduzir à formação de capas de alteração (figura 10) através da precipitação de oxalatos de cálcio no caso das rochas calcárias (whewellite ( $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) e weddellite ( $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ )), a partir da secreção de ácido oxálico, bem como à formação de um solo incipiente, onde se pode desenvolver flora contendo musgos e plantas superiores, resultante da dissolução de minerais pelos líquenes e da agregação de matéria orgânica.

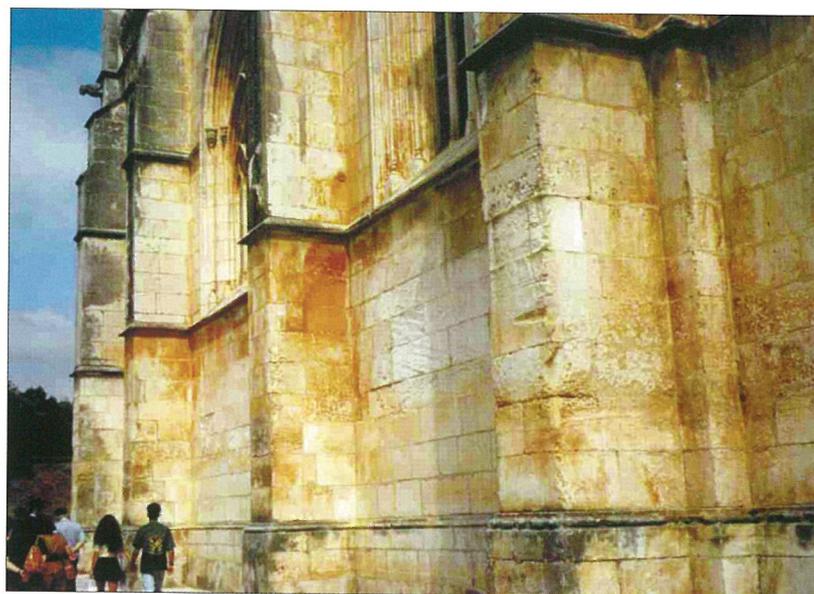


figura 11 Mosteiro da Batalha. Desenvolvimento de pátinas laranjas.

A actividade microbiótica pode no entanto ter um papel positivo na prevenção da evolução do processo degradativo, através da formação de capas de protecção biogénicas – pátinas. Este processo produz como que a passivação da rocha dado que a weddellite e a whewellite têm menor solubilidade que a calcite.

Relativamente às pátinas laranjas observadas nos paramentos exteriores do Mosteiro da Batalha (figura 11), trata-se de típicas pátinas de oxalatos que mostram a presença de hidroxiapatite em algumas amostras e de nitratos na maioria (AIRES-BARROS *et al.*, 2001).

De entre os animais, as aves, e em especial os pombos, têm um papel importante no decaimento das rochas, visto os seus excrementos conterem ácido fosfórico e nítrico (figura 12 e 13). Estes ácidos têm grande poder de ataque químico, em especial sobre rochas calcárias. Não é despiciente a acção mecânica de desgaste que as aves exercem sobre o lavrado dos monumentos (bicadas, unhas, nidificação).

### Considerações Finais

A rocha é um material de tradição milenar, sendo possivelmente aquele que é usado com maior frequência como ma-

terial de construção nos edifícios e monumentos historicamente relevantes. Muitos destes monumentos sofreram danos como consequência de factores ambientais, do uso de materiais incompatíveis, de operações de manutenção inadequadas ou de medidas de conservação inapropriadas efectuadas ao longo da sua história.

As rochas aplicadas num monumento, em contacto com a atmosfera, com a chuva, com as variações térmicas, com a luz, com a biosfera, etc., tornam-se sede de inúmeras acções e reacções que se desencadeiam sem cessar. As rochas evoluem, alteram-se procurando novas condições de equilíbrio.

De entre os factores e agentes do decaimento químico das rochas, e das rochas calcárias em particular, destaca-se a contaminação atmosférica, a água, o aerossol marinho e os organismos vivos.

Segundo a Carta de Cracóvia (2000), a "conservação (do património) pode ser realizada mediante diferentes tipos de intervenções como o controlo do ambiente, a manutenção, a reparação, a renovação e a reabilitação" e é feita segundo um projecto de restauro que "deverá basear-se numa gama de operações técnicas apropriadas e preparadas segundo um processo construtivo que integra a recolha de informação e o co-

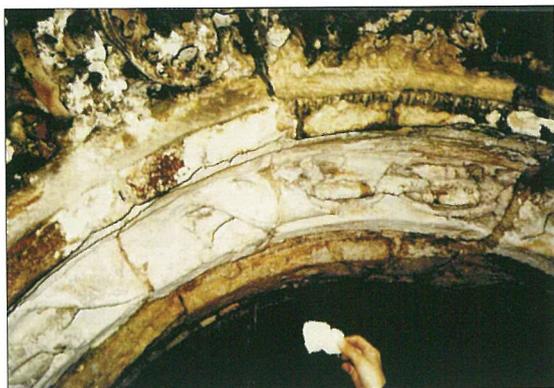


figura 12 Mosteiro de Santa Cruz em Coimbra. Fenómenos de lascagem com formação de eflorescências salinas de niter.



figura 13 Observação à lupa binocular de eflorescências salinas apresentadas na figura 12

nhecimento profundo do imóvel e/ou da sua localização". Torna-se assim importante no estudo de um monumento, ou sua parte relevante, o conhecimento dos factores que desencadeiam e favorecem o aparecimento de determinadas patologias, por forma a que as intervenções a levar a cabo sejam as mais adequadas de modo a retardar o processo degradativo em curso e desta forma sejam preservadas as mensagens e os valores intrínsecos dos monumentos.

#### Referências Bibliográficas

C. A. M. Figueiredo, A. A. Maurício, L. Aires-Barros (2001) – Geoquímica das águas da

chuva e o seu papel no decaimento das pedras da Basílica da Estrela (Lisboa, Portugal). *Proceed. 6.º Cong. Geoq. Pais de Língua Portuguesa*, pp. 354-358, Faro.

L. Aires-Barros, M. J. Basto, A. E. Charola (2000) – Black crusts: "Fossil" and Modern. A comparison from two case studies in Coimbra monuments (central Portugal). *Int. Zeitschrift für Bauinstandsetzen und Bau- denkmalspflege*, 6. Jahrgang, Heft 1, pp. 63-72.

L. Aires-Barros (2001) – As rochas dos monumentos portugueses. Tipologias e patologias. *Cadernos do Instituto Português do Património Arquitectónico (IPPAR)*, nº 3, 2 vol, 535p., Lisboa.

L. Aires-Barros, M. J. Basto, A. Dionísio, A.E. Charola (2001) – Orange coloured surface deposits on stones from the Monastery of

Batalha (Portugal) and from nearby historic quarries: characteristics and origins. *Int. Zeitschrift für Bauinstandsetzen und Bau- denkmalspflege*, 7. Jahrgang, Heft 5, pp. 491-506.

M. A. A. R. Dionísio (2002) – Degradação da pedra em edifícios históricos. O caso da Sé de Lisboa. Tese apresentada à Universidade Técnica de Lisboa com vista à obtenção do grau de Doutor em Engenharia de Minas, 347p., Lisboa.

#### Agradecimentos

O trabalho apresentado contou com o suporte do Centro de Petrologia e Geoquímica do Instituto Superior Técnico.

# Consequências da Revisão Curricular do Ensino Secundário no ensino da Engenharia

HENRIQUE SANTOS, JOSÉ CAVALHEIRO\*

Foi aprovado no Conselho de Ministros do dia 7 de Janeiro o diploma de Reforma Curricular do Ensino Secundário (RCES) disponível no endereço electrónico do Ministério da Educação.

Apesar de numerosas críticas apresentadas por variados sectores durante a fase de discussão, o documento mantém disposições altamente preocupantes, que a subsistirem terão enorme impacto na formação das novas gerações.

Num momento em que a procura dos cursos de Engenharia sofre uma clara quebra, devida a causas insuficientemente caracterizadas pelos organismos dos Ministérios da Educação e da Ciência e do Ensino Superior, mas entre as quais se deve encontrar uma questão de moda e uma fuga às disciplinas de Matemática e Física, importa reflectir sobre a influência das medidas tomadas pelos Ministérios que tutelam a Educação no perfil dos quadros de que o País vai dispor no futuro.

Se existe a preocupação de incrementar o número de licenciados nas áreas da Engenharia e das Ciências Exactas, nas quais o País é deficitário, visando transferir o modelo económico de produção centrado no factor "mão-de-obra barata" para "mão-de-obra altamente qualificada", há que tomar medidas pro-activas que induzam a procura dessas áreas de formação superior; e isto porque essas áreas de formação são estratégicas, constituindo indicadores necessários à

promoção de investimento e ao aumento de produtividade.

O *laissez faire* ou o "deixar o mercado funcionar" mais não é do que confiar a terceiros a condução da política de prioridades, pois a moda que momentaneamente se traduz na afluência maciça a alguns cursos não nasce de geração espontânea; os Ministérios que tutelam a Educação devem actuar e não ser meros anotadores das inclinações induzidas nos estudantes! Nomeadamente fornecendo aos alunos e respectivos agregados familiares dados sobre a empregabilidade associada às diferentes formações disponibilizadas pelo ensino superior, o que só é possível se existir um observatório que seja responsável por processar esta informação – e este observatório não existe! E se o governo não entender atrair os estudantes para as áreas de Engenharia e das Ciências Exactas, pode pelo menos sugerir-se que não os afaste e não contribua para degradar a qualidade da respectiva formação; há alterações desta índole estabelecidas na actual RCES, como se demonstra em seguida.

De facto a RCES veio tornar obrigatória no Curso de Ciências e Tecnologias (aquele que permite o ingresso nas Ciências Exactas, Saúde e Engenharia) apenas uma de duas disciplinas bi-annuais: [Física e Química A] e [Biologia e Geologia]. Os alunos poderão frequentar no 10.º ano as duas disciplinas ou uma

delas apenas; se optarem pela [Biologia e Geologia], poderão ainda no 11.º ano frequentar [Física e Química A] ou não; e se não o fizerem, concluirão o 12.º ano sem frequentarem esta disciplina e obviamente sem frequentarem também a disciplina de Física ou Química individualizada que no 12.º ano lhe daria seguimento

Através desta Reforma Curricular, o governo dá explicitamente a orientação aos alunos que acabam de concluir o nono ano de que é possível virem a enveredar pela área das Ciências e Tecnologias sem aprofundarem os conhecimentos de Física e Química do ensino obrigatório. **Assim, por via administrativa, passa a considerar-se oficialmente que se pode enveredar por uma carreira técnica sem conhecimentos em áreas estruturantes fundamentais** (irá esta medida ser realçada como um factor positivo nas acções de promoção de Portugal como um local atractivo de investimento de alta tecnologia?)

Uma das razões para tornar estas disciplinas opcionais poderá ser a elevada taxa de insucesso, em particular no caso da Física. Compete ao Estado, como entidade reguladora, procurar e implementar soluções para as causas deste insucesso, em vez de adoptar medidas administrativas que diminuam a frequência de disciplinas problemáticas e assim se promova artificialmente o sucesso.

\* Professores da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, s/n, 4200-465 Porto, PORTUGAL

Quando a evolução tecnológica exige uma formação cada vez mais profunda no domínio das Ciências Exactas, o governo adopta, apesar das chamadas de atenção de muitas escolas e instituições profissionais, uma medida com efeitos catastróficos no acesso a esses cursos: de facto, não é necessário ser profeta para prever que o número de estudantes com as habilitações necessárias para o ingresso na Engenharia vai sofrer uma intensa redução, agravando a actual tendência de fuga desta área de formação.

E estarão os cursos de Engenharia em condições de manter a disciplina de Física como específica, tendo em conta a crise de procura por que têm vindo a passar? Poderão correr o risco de ficarem sub-povoados e suportarem o sub-financiamento consequente, se mantiverem essa exigência? Não estará a RCES a impor às Ciências Exactas e Engenharia que adulterem os seus critérios de ingresso, limitando as disciplinas específicas à Matemática?

Mais grave é que a formação deficiente em disciplinas estruturantes coincide com a previsível redução da duração de cinco anos para quatro dos planos de estudo do Ensino Superior, imposta pela uniformização da arquitectura deste ensino aprovada na Declaração de Bolonha! A superação dum deficit que pode ir até três anos de aprendizagem não poderá ser conseguida no Ensino Superior, quando se vai contrair em 20% a actual dimensão curricular, sendo ainda certo que a RCES já prevê também a redução de 350 para 270 do número de horas de escolaridade global de Física e Química (CFQ) com a supressão da disciplina de Técnicas Laboratoriais.

Vem a propósito transcrever parcialmente o "Parecer da Sociedade Portuguesa de Física", emitido em Janeiro do corrente ano, durante o período de discussão pública do diploma, sobre o conteúdo do Documento Orientador da RCES, que como agora se verifica foi simplesmente ignorado:

*"1.º A Física, nas suas vertentes teórica, experimental e aplicada, deve ser um elemento estruturante da cultura científica do cidadão comum por constituir a base das actuais ciências experimentais e das tecnologias que delas emergem;*

*2.º A Física deve fazer parte da formação básica dos estudantes que pretendem iniciar cursos superiores de ciências e de engenharia;*

*3.º Um bom conhecimento de Física promove a inovação científica e tecnológica indispensável ao aumento da produtividade;*

*É preocupante a deficiente preparação científica de muitos estudantes que acedem ao ensino superior e também a daqueles que não seguem estudos terciários, os quais constituem a grande maioria dos cidadãos portugueses. Ora, o documento em apreço [RCES], contém disposições que não permitem alterar esta situação.*

*De facto, a matriz curricular proposta para o Curso de Ciências e Tecnologias retira as disciplinas de Física, Química, Biologia e Geologia do núcleo de disciplinas obrigatórias do ensino secundário, dando-lhes um carácter opcional. Isto não só empobrece a formação científica dos estudantes graduados pelo ensino secundário como, a manter-se o actual sistema de acesso ao ensino superior, obriga os estudantes a fazer opções definitivas de vida profissional quando terminam o ensino básico, o que é incontrovertidamente cedo demais. Além disso a matriz curricular proposta contém incongruências evidentes, tais como:*

*a) permitir que um aluno ingresse numa escola de ciências, engenharia, medicina, farmácia, etc, sem nunca ter aprendido Física no ensino secundário, quando alguns desses cursos exigiram a frequência de três anos de Física nesse nível de ensino;*

*b) não permitir que os alunos do 12.º ano possam frequentar pares de disciplinas que são hoje obrigatórias para ingresso em cursos universitários*

*de grande procura (uma decisão deste teor deveria ser tomada em consonância com as escolas de Ensino Superior e com o Ministério da tutela);*

Mesmo numa óptica duma opção não tecnológica, será possível avançar no estudo da Biologia e da Geologia, por exemplo, apenas com os conhecimentos elementares de Física e Química do 9.º ano?

Como referiu o Prof Carlos Correia, da Faculdade de Ciências da UP, em documento tornado público: *"A impressão de anti-Ciência tornou-se certa ao analisar a revisão curricular do ensino secundário, em que há uma diminuição apreciável da formação científica dos alunos, quer a nível teórico quer prático, sem a necessária complementaridade das áreas científicas de Física, Química, Biologia, Geologia."*

Em resumo, com a RCES corremos o risco de daqui a quatro anos assistirmos a uma queda abrupta no número de potenciais candidatos ao ingresso em Engenharia e dum modo geral a um claro empobrecimento da formação geral em disciplinas científicas essenciais como a Física e a Química. Esta formação deficiente não pode ser compensada no Ensino Superior, pois coincide com a redução da duração de cinco para quatro anos dos planos de estudo deste grau de ensino, imposta pela Declaração de Bolonha!

As consequências da persistência deste erro a outros níveis, nomeadamente na competitividade económica, são demasiado preocupantes para que possamos aceitá-las em silêncio. Contribuamos pois, dentro da esfera de influência de cada um, para criar um movimento por **uma correcção à RCES que reponha o carácter de obrigatoriedade à disciplina bienal de [Física e Química A] no Curso de Ciências e Tecnologias.**

# Física e Química – A mesma linguagem?<sup>1</sup>

ADRIANO SAMPAIO E SOUSA E PAULO SIMEÃO CARVALHO<sup>2</sup>

## Resumo

Neste trabalho é focada a importância da linguagem no ensino das ciências. São identificadas algumas situações concretas em que não existe uma linguagem comum

entre a Química e a Física, para a descrição de um mesmo conceito. Atendendo à perturbação que tal facto pode suscitar na aprendizagem dos alunos, propõem-se algumas estratégias de superação.

## Introdução

O poder das palavras é raramente reconhecido pelos professores como a essência do ensino e aprendizagem da Ciência, sendo a principal tónica colocada geralmente na experiência física e no trabalho prático. Não pretendendo retirar a este último a sua importância real, particularmente nos níveis de ensino mais elementares, queremos contudo realçar que as questões de linguagem são responsáveis por uma boa parte do insucesso escolar e do alheamento crescente dos alunos em relação ao estudo da Ciência. Veja-se por exemplo o importante estudo realizado recentemente em Portugal com alunos dos ensinos secundário e universitário (Leite e Almeida, 2001).

Neste trabalho partiremos das seguintes premissas: (1) Aprender a linguagem científica é uma parte importante da educação científica. (2) A linguagem é um dos principais obstáculos para a aprendizagem da Ciência pelos nossos alunos. (3) Existem várias estratégias de ensino que podem ajudar a ultrapassar estas barreiras (Wellington e Osborne, 2001; Sutton, 1992).

### (1) Aprender a linguagem científica

A relação entre a linguagem e o pensamento é extremamente importante. Vygotsky (1987) estudou esta relação, tendo estabelecido a sua reciprocidade: o desenvolvimento de uma contribui para o desenvolvimento da outra; isto é particularmente notório a partir do início da escolaridade, mas verifica-se já durante as primeiras fases de aprendizagem da linguagem oral "em casa". Para o progresso desta aprendizagem e para o desenvolvimento da linguagem escrita, a leitura – hoje em dia tão pouco cultivada entre os jovens – é um factor de importância primordial.

A "linguagem do quotidiano" desenvolvida pela criança e pelo adolescente é fortemente influenciada por factores sócio-culturais; assim, o significado dos termos tem um carácter relativo, variando muitas vezes com o contexto e com o meio. Pelo contrário, a linguagem científica caracteriza-se pela sua generalidade e universalidade, tendo cada termo um significado preciso. Contudo, aplicam-se frequentemente palavras e expressões retiradas do quotidiano para designar os conceitos científicos; este hábito é responsável por muitas dificul-

dades dos alunos, que utilizam designações conhecidas sem se aperceberem de que o seu significado mudou completamente (Lee, Smagorinsky, 2000). Torna-se assim evidente que, para a compreensão da Ciência é fundamental, não só o domínio da metalinguagem científica (Leite, Almeida, 2001), como também uma clarificação entre as designações do quotidiano e os termos científicos.

### (2) Linguagem como obstáculo

Ouvimos muitas vezes os professores de Física e Química reclamarem, justamente, contra a falta de articulação entre os programas e as práticas lectivas da sua área e de outras áreas científicas afins, como a Matemática e as Ciências Naturais; os alunos aprendem muitas vezes o mesmo conceito em contextos diferentes, criando esquemas cognitivos separados, ou aplicam o mesmo termo a fenómenos diferentes, criando duas definições paralelas. Mas será que a própria linguagem da Física e da Química, leccionadas em conjunto pelo mesmo docente, nos ensinos básico e secundário, se encontra unificada?

<sup>1</sup> Comunicação oral apresentada no III Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química, da Sociedade Portuguesa de Química, realizado em 21 de Novembro de 2003, na Póvoa de Varzim.

<sup>2</sup> Departamento de Física, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

Estas duas Ciências tiveram como objecto, desde as suas origens, uma abordagem dos fenómenos a escalas diferenciadas: a Física dirigia os seus interesses para a escala macroscópica e para a escala subatómica, enquanto a Química se ocupava tradicionalmente da escala molecular. Este facto levou ao desenvolvimento, nestas duas áreas, de uma linguagem própria para a caracterização dos fenómenos, adequada à especificidade de cada uma. Como consequência, a descrição de um mesmo fenómeno sob o ponto de vista da Física e da Química é feita de forma diferente, muitas vezes com carácter complementar, mas que para um aluno (ou professor menos atento) sugere formas alternativas de interpretação desse fenómeno.

Além disso, o ensino da Física e da Química (e de outras Ciências) tem sido implementado habitualmente de modo compartimentado, quer no ensino básico, quer no ensino secundário. Para os alunos, isto é muitas vezes interpretado como fruto da inexistência de articulação entre conteúdos destas duas áreas; assim, quando o mesmo fenómeno é abordado na Física e na Química, os alunos não conseguem relacionar as duas descrições e tendem a optar por uma delas, consoante o contexto em que o fenómeno aparece.

Apresentamos em seguida alguns exemplos de conceitos acerca dos quais são frequentemente transmitidas diferentes perspectivas no âmbito do ensino da Química e da Física.

## Estado / Fase

### Perspectiva da Química

- Atenção especial aos aspectos estruturais.
- Ênfase no conceito de estado.

### Perspectiva da Física

- Aspectos microscópicos e propriedades macroscópicas. Ênfase no conceito de fase.

A noção de estado está relacionada com a estrutura da matéria, enquanto a noção de fase se encontra relacionada com a homogeneidade e uma fronteira

bem definida entre subsistemas do sistema em estudo. São conceitos diferentes, que se complementam: é necessário clarificar a distinção entre os termos fase e estado, pois a confusão entre ambos é frequente, quer por parte dos alunos, quer até dos próprios docentes. Expressões do tipo "durante a evaporação as moléculas mudam de estado" (e não de fase, como seria correcto) são utilizadas displicentemente.

## Substância

### Perspectiva da Química

- Sinónimo de pureza.
- Uso da expressão "substância pura" como redundância de linguagem – perigo de indução da concepção errónea "substância impura".

### Perspectiva da Física

- Uso indiscriminado da palavra "substância" para designar vários materiais.

*Ex. Introdução de impurezas nas substâncias (dopagem)*

Devem ser evitadas expressões redundantes como "substância pura" (existem outros exemplos, como "luz visível" ou "som audível") e utilizadas de forma correcta as palavras "substância" e "mistura".

## Quantidade de matéria/substância

### Perspectiva da Química

- Quantidade de substância como grandeza SI.
- Inicialmente aplicada a substâncias, depois também alargada à matéria em geral.

*Ex. electrões, iões...*

### Perspectiva da Física

- Quantidade de matéria como definição operacional de massa (antes da introdução das leis de Newton).

Os alunos devem ser alertados explicitamente para as definições e especificidades destes dois conceitos, que são totalmente diferentes. A definição operacional de massa deve ser substituída logo que possível pelo conceito de

massa inercial (e, mais tarde, massa gravitacional).

## Densidade

### Perspectiva da Química

- Característica de uma substância.
- Critério de pureza.
- A propósito da estrutura da matéria, é associada ao "empacotamento das partículas".

### Perspectiva da Física

- Proporcionalidade entre massa e volume: massa de uma unidade elementar de volume.

A definição deste conceito, que é um só, deve ser construída à custa dos diferentes atributos que lhe são imputados, quer na Química, quer na Física, já que as duas perspectivas se completam.

## Energia

### Perspectiva da Química

- Por vezes associada à intensidade de uma força.

*Ex. Energia de ligação:*

*forças de ligação fracas  $\Leftrightarrow$  baixa energia de ligação*

*forças de ligação fortes  $\Leftrightarrow$  alta energia de ligação*

### Perspectiva da Física

- Não existe ligação directa entre os conceitos de energia e força.

*Ex. Energia mecânica associada ao trabalho das forças; energia cinética associada ao movimento (velocidade)*

Deve ser evitada, tanto quanto possível, a relação directa entre energia e força pois os alunos tendem a não discriminar os conceitos "energia", "força" e "velocidade", como apontado desde há décadas por inúmeros investigadores; isto impossibilita uma aprendizagem significativa de qualquer um destes conceitos.

### Motivação

Um dos possíveis motivos que levam os nossos jovens a abandonar precocemente a ciências é a desmotivação (passe o termo) que entre eles se instala por *não sentirem o problema*, pelo facto de não *meterem a mão na massa*. Com isto queremos apenas dizer que o ensino das ciências (apesar de todas as novas correntes de ensino) ainda se tem centrado muito no transmitir conhecimentos para decorar, para ser avaliado, para prosseguir os estudos, para...

Por *meter a mão na massa* queremos dizer, aguçar a natural curiosidade do jovem de tal forma que ele aborde o problema (qualquer problema!) de uma forma tanto quanto possível empírica, para que a *explicação científica* surja depois como reforço explicativo gratificante (e não como uma maçada, chatice, mais uma equação para decorar...).

Existe uma actividade diária que, de tão banal (como necessária), dela nos esquecemos quando queremos dar exemplos práticos da ciência do dia-a-dia, nomeadamente da química –trata-se da **alimentação**.

A alimentação, nas suas várias vertentes –preparação, conservação, confecção– é um processo em tudo semelhante ao que se passa num laboratório. Na realidade, os químicos e os chefes de cozinha têm muito em comum (aliás existem alguns que são simultaneamente as duas coisas) e possuem uma abordagem idêntica, por exemplo, no manejo dos utensílios (tachos, panelas, facas, fornos, etc., devem ser utilizados com os cuidados que se devem observar com provetas, mantas de aquecimento, etc.). E que dizer dos reagentes e das fórmulas? Quando elaboramos os alimentos seguimos receitas em tudo parecidas com os procedimentos laboratoriais. "Batam-se 6 claras com um garfo, juntando umas gotas de limão ou umas pedras de sal, até ficar em consistência em castelo", é uma acção tão protocolar como "Pesar depressa mas rigorosamente 0.40g de NaOH, dissolver em 100mL de água e com esta solução titular uma solução aprox. 5% de ácido acético".

Por outro lado, temos a noção que os procedimentos laboratoriais são infalíveis, isto é, se repetirmos a mesma experiência com os mesmos reagentes nas mesmas condições, obteremos o mesmo resultado –final esta é a base do método científico usado nos últimos 4 séculos. Em contrapartida, todos nós sabemos, empiricamente, que o bolo não sai sempre da mesma maneira (mas cuidado, há até quem ache que a posição da lua, ou a altura o mês pode influenciar o bolo ou a maionese, ou ...).

Nesta actividade propomos algo diferente do que habitualmente se faz num laboratório e que vai permitir debater, entre outros, estes 2 conceitos que apontámos acima: algo muito prático e que qualquer aluno sabe, mas sobre o qual pode nunca ter pensado cientificamente e que permita discutir a questão da repetibilidade de um procedimento laboratorial.

Para tal, vamos fazer várias versões de um bolo de uma forma não muito convencional –num copo ou caneca–, trabalhando com doses individuais e um método muito rápido de cozedura –um forno de microondas. Este, por sua vez, até pode servir de tema de conversa sobre a inocuidade do microondas na cozedura de um bolo (sim porque ainda existem muitos mitos) e ao mesmo tempo para explicar como funciona o aquecimento com um microondas. Neste caso pode (consoante o grau de escolaridade envolvido) explicar-se a transferência de energia num forno de microondas desde a rotação rápida das moléculas de água (ou outro líquido), por exemplo, experimentar aquecer na potência do microondas apenas os sólidos do bolo para verificar que não aquecem, até aos fenómenos de da cavidade de microondas, por exemplo, pincelar ou espalhar clara de ovo num prato e colocá-lo no interior do microondas sem que este rode, para verificar os nodos internos da cavidade (e consequentemente explicar que é por isso mesmo que se usa um dispositivo que rode para que o aquecimento se processe de forma uniforme).

Depois de cozinhar este bolo faremos outro da mesma forma, mas em que trocaremos os reagentes/ingredientes habituais por outros não imaginados para a função, por exemplo, o ovo é trocado por detergente líquido (?!?!). Esta parte da experiência servirá para explicar o que cada ingrediente do bolo está lá a fazer.

### A acção da farinha

A farinha é uma mistura complexa de componentes orgânicos –macromoléculas (amido, proteínas), açúcares (mono, di, e oligossacáridos), lípidos (matéria gorda)– e matéria inorgânica –água e sais minerais. Do ponto de vista estritamente nutritivo, o factor mais interessante na farinha (qualquer farinha alimentar) é o de as proteínas estarem em elevada concentração. No entanto, do ponto de vista do acto culinário, a presença de um elevado teor em proteína, provoca, na presença dos sais e quando se lhe junta água (ou outro líquido) a desnaturação dessa proteína. Neste caso, essa desnaturação conduz à formação de uma rede polimérica extensa com propriedades elásticas consideráveis e que consiste na proteína inchada pela água –o glúten. No entanto, como se trata de um polieletrólito, a proteína inchada vai comportar-se como um gel com propriedades reológicas (elevada força de coesão) essenciais à formação do pão e massas consistentes, mas não de um bolo, que se quer fofo. É por isso que a farinha para bolos tem uma quantidade reduzida de proteína, suficiente para a formação de uma rede polimérica mas muito menos coesa permitindo apenas aguentar a estrutura com imenso ar pelo meio.

### A acção do fermento e da mistura mais ou menos vigorosa

O fermento (sólido) das farinhas consiste numa mistura de bicarbonato de sódio mais

um ácido e amido (que absorve a humidade e evita a reacção entre ambos). Ao misturar-se o fermento com água (ou outro líquido que a contenha) os seus constituintes dão origem a um sal, água e dióxido de carbono. É este CO<sub>2</sub> que ao ser libertado em pequenas bolhas no seio da massa que está a ser mexida, vai dar a textura fofo ao bolo. Se se mexer a massa apenas a envolver os ingredientes de forma a tornar a mistura homogénea, o resultado é que o CO<sub>2</sub> permanecerá incorporado na massa, e portanto o bolo vai crescer. Caso se proceda a uma mistura vigorosa e prolongada da massa, o CO<sub>2</sub> perde-se e o bolo terá um aspecto compacto. Existe também um efeito de temperatura, que pode ser experimentado simplesmente fazendo a mistura de fermento em água fria, ou em água quente (>60°C).

### A acção do açúcar

O açúcar, além do efeito óbvio, vai também contribuir para que as proteínas formem menor número de ligações da rede acima descrita (em virtude de formar ligações açúcar-proteína), ajudando a tornar a estrutura do bolo mais fofo. Pode reduzir-se a quantidade de açúcar para \_ ou mesmo 1/10 (scones) do valor recomendado para se comparar a textura com a da receita original.

### A acção do leite

O leite vai essencialmente contribuir com a água necessária para humidificar o bolo (aliás pode muito bem substituir-se o leite por água), contribuindo em muito menor escala com algumas proteínas e sabor.

### A acção do óleo (ou outra gordura)

O óleo, contribui com a gordura necessária para amaciar o paladar do bolo (além de acrescentar sabor) e exerce uma função adicional de protecção das proteínas da farinha que, ao evitar a formação de glúten, torna o bolo mais fofo.

A acção destes dois ingredientes juntos – óleo (hidrofóbico) e água (hidrofílica) (como o azeite e o vinagre) – só é possível graças à presença do ovo, cujas proteínas fornecem a emulsionante necessário (como também acontece na maionese).

### A acção dos ovos

Os ovos representam uma parte importante no processo. As proteínas de que são feitos desnaturam por efeito mecânico (claras em castelo), ou por efeito de sal ou ácido (experimentalmente 1 gota de limão em cima das claras e vejam estas a ficar brancas e duras, percebe-se por isso porque 1 gota de limão ajuda a que as claras em castelo não deslassem) ou ainda por efeito da temperatura (ovo cozido, frito, estrelado, etc.). A incorporação do ovo no preparado para o bolo vai, por efeito da temperatura, ajudar rapidamente à solidificação do bolo. Neste caso, é visível no forno microondas que o bolo vai começar a solidificar por inteiro e subir mesmo para fora do copo/caneca.

A acção emulsionante das proteínas do ovo pode então ser compreendida substituindo-o por uma quantidade equivalente de detergente líquido (por vezes é necessário experimentar antecipadamente a quantidade de detergente, uma vez que existem mais ou menos concentrados no mercado).

### A acção do forno microondas

É de notar que fazer um bolo destes em 2-3 minutos só se consegue porque a potência de aquecimento é razoável, mas também porque a temperatura é homogénea em toda a massa do bolo. Este efeito é visível no forno microondas, podendo observar-se que o bolo vai começar a solidificar por inteiro (e subir mesmo para fora do copo/caneca) enquanto que num bolo convencional existem tensões na massa e a solidificação se dá de forma diferenciada, ficando sempre o bolo com um ar arredondado no topo.

A radiação de microondas (frequência @ 2.45GHz) ao atravessar os alimentos altera as suas propriedades eléctricas, quer fazendo rodar as moléculas polares (como a da água), quer originando correntes eléctricas dos iões em solução (sais, ácidos, etc. presentes nos alimentos). O facto de a água estar em pequenas quantidades na massa do bolo leva a que as moléculas sejam amortecidas (a rotação não é livre) e consequentemente percam energia para o resto da massa sob a forma de calor (como no fenómeno de atrito). O facto de a massa ter gordura, açúcares e outro polímeros não polares, baixa-lhe a sua capacidade térmica, consequentemente, para a mesma quantidade de energia recebida a massa aquece mais que outros alimentos, e, portanto, coze mais depressa.

Um exercício interessante consiste em demonstrar a validade do Princípio de Lavoisier na confecção deste bolo. Peça-se aos alunos para pesar o copo/caneca com o conteúdo antes e depois de *cozinhado*, para se aferir que a evaporação de líquidos foi mínima (não detectável na maioria das balanças). Na realidade, pode pedir-se aos alunos que façam o mesmo exercício em casa quando for confeccionado um bolo *tradicional* (de maiores dimensões) e comentar, porque é que na confecção num forno existem perdas de massa (as balanças de casa devem ter sensibilidade para medir a diferença da água evaporada) e no forno de microondas tal não se passa (as perdas devem-se essencialmente ao tempo elevado de cozedura que permite a difusão continuada da água para fora do recipiente e depois para fora do forno, enquanto que no copo, em 2-3 minutos, praticamente não se perde líquido).

Quando grande parte das pessoas ouve falar em Química, normalmente associam a palavra a coisas desagradáveis, como pesticidas, poluentes, contaminantes. Nem se lembram que a vida de hoje sem plásticos, produtos farmacêuticos, corantes (para as roupas, a coca-cola, ou qualquer outra coisa pintada), etc... não seria possível. Mesmo sem esses exemplos, existem coisas que fazemos todos os dias e que, se estivermos com atenção, veremos nelas Química, e ainda por cima uma química divertida.

Vamos levar o laboratório para a cozinha e vamos usar *reagentes e material* que estás habituado a ver noutro contexto. Vamos *meter as mãos na massa* e fazer um bolo de uma forma não muito convencional mas que servirá para exemplificar o que acontece quando fazemos um bolo de chocolate *tradicional* e para explicar o que cada ingrediente do bolo *está lá a fazer*.

#### Reagentes:

40g de farinha com fermento  
50g de açúcar  
10g de cacau  
1 ovo  
10mL de óleo  
10mL de leite

#### Material

Copo ou caneca para ir ao microondas  
Espátulas (ou colher)  
Agitador (ou garfo)  
Microondas

#### Procedimento

Misturar homogeneizando a farinha (com fermento) com o açúcar e o cacau. Misturar o ovo e incorporar o óleo e o leite.

Levar ao microondas na potência máxima cerca de 2 a 2\_ minutos.

Nota: Pode fazer-se numa caneca mas se se fizer num copo ainda é mais espectacular porque se pode observar todo o processo durante a cozedura.

Estarão todos a comentar "mas isto é uma receita muito pequena para um bolo simples de chocolate!". Não, não se trata de uma receita para o "chá de bonecas", trata-se de uma receita para uma dose individual de um bolo de chocolate, em vez da tradicional fatia de bolo de chocolate feita de um bolo de *dimensões* normais. Vamos misturar os *reagentes/ingredientes* e observar o que se passa quando os misturamos.

Já devem ter ouvido que a ordem pela qual se misturam os ingredientes não é arbitrária. Haverá algum motivo para isso? Ou será apenas porque é mais um dos hábitos culinários e/ou culturais? Discutam com o/a vosso/a professor/a.

Claro que se a mistura de sólidos for homogénea torna mais fácil a sua solução ou incorporação com outros constituintes e, consequentemente, a *reação* (cozedura). Por outro lado, também a mistura também não deve ser feita de qualquer maneira. Veremos seguidamente o efeito nefasto que pode ter mexer demasiado a massa do bolo.

Agora vamos agora repetir a experiência anterior alterando, alternadamente, um dos reagentes para perceber de uma forma racional como cada um deles intervém na reação.

#### 1ª variante – Substituir o ovo por cerca de 10mL de detergente comercial da loiça.

Com o mesmo procedimento e seguindo a metodologia anterior (tempo de cozedura inclusive), refazer o *bolo*. Discute o que aconteceu. O produto obtido agora tem o aspecto do bolo inicial? Se sim, isso quer dizer que no processo químico que ocorre na mistura de reagentes o ovo vai desempenhar as mesmas funções do detergente? Quais serão essas funções?

#### 2ª variante – Substituir a farinha com fermento por uma que não tenha fermento.

Discute com o professor em que consiste o fermento que está na farinha por forma a perceber a diferença entre as duas situações.

Para perceber o efeito de temperatura, mistura a mesma quantidade (1 colher de chá) fermento em água (50mL) fria e água quente (>60°C) e observa o que se passa. Discute as reações que estão a ocorrer.

#### 3ª variante – Não colocar óleo.

Com procedimento inicial (tempo de cozedura inclusive), refazer o *bolo*. Discute o que aconteceu. O produto obtido agora tem o aspecto do *bolo* inicial? Em que medida é que o óleo ajuda na confecção do *bolo*?

#### 4ª variante – Reduzir o açúcar para 10g (ou mesmo na totalidade)

Com procedimento inicial (tempo de cozedura inclusive), refazer o bolo. O produto obtido agora tem o aspecto do bolo inicial? Em que medida é que o açúcar ajuda na confecção do bolo? Discute com o/a professor/a o resultado.

#### 5ª variante – Agitação vigorosa

Com procedimento inicial (tempo de cozedura inclusive), refazer o bolo mas só após mexer a massa com uma batedora tipo varinha-mágica durante pelo menos 10 minutos. Discute o que aconteceu. O produto obtido agora tem o aspecto do bolo inicial? Em que medida foi a estrutura da massa afectada pela agitação vigorosa? Ter-se-ão quebrado ligações? Ou algo mais ocorreu?

Quando fizeres estas experiências deves lembrar os princípios básicos que regem a química, nomeadamente o princípio de Lavoisier. Assim, pesa o copo/caneca com o conteúdo antes e depois de *cozinhado*. O resultado era o esperado desta reação? Discute com o/a professor/a o resultado.

Discute também com o/a professor/a o porquê da utilização do forno microondas neste caso e tenta saber como funciona

Visitem o endereço "A Cozinha é um laboratório" do Programa Ciência Viva <http://www.cienciaviva.pt/divulgacao/Cozinha/> para tirarem mais ideias para a vossa próxima experiência *gastronómica*.

E existem muitos mais sites onde podes ir buscar informação interessante para tema de conversa e debate com os professores e colegas. A título de exemplo:

A química da cozinha

<http://www.ajc.pt/ciencia/n04/marado.php3>

Ciência em casa

<http://cienciaemcasa.cienciaviva.pt/index.html>

La main a la pate

<http://www.inrp.fr/lamap/>

How Things Work

<http://howthingswork.virginia.edu/>

Experimentos para a sala de aula

<http://www.professorberti.hpg.ig.com.br/EXPERIM.htm>

Sem dúvida, uma cozinha é um laboratório. De cheiros e gostos, de emoções e histórias. Agora *mãos à massa* e divirtam-se.

António Lopes, [alopes@itqb.unl.pt](mailto:alopes@itqb.unl.pt)



## Velocidade

### Perspectiva da Química

- Conceito de velocidade associado à ideia de rapidez ou taxa de variação.

*Ex. Velocidade de reacção.*

### Perspectiva da Física

- Grandeza vectorial, definida à custa do vector deslocamento. Contém, como caso particular, o conceito de rapidez.

Tratando-se de um conceito de tão grande importância e elevado grau de dificuldade para os alunos, torna-se aqui evidente a necessidade de uniformizar/clarificar a linguagem entre a Química e a Física; assim, recomenda-se um uso correcto das designações "velocidade" e "taxa de variação".

Não pretendemos neste trabalho esgotar todas as situações: haverá certamente mais casos em que a linguagem utilizada no ensino da Química e da Física (e de outras Ciências) carece de uma maior uniformização. Assim, encorajamos os professores a estarem atentos e identificarem outros casos nas suas práticas lectivas e a efectuarem a sua divulgação.

### (3) Estratégias de ensino

Sendo a linguagem científica uma parte importante da literacia e verificando-se que pode ser um obstáculo à aprendizagem da Ciência pelos alunos, é neces-

sário recorrer a novas estratégias de ensino que possam contribuir para minorar o problema.

Neste sentido, constata-se que a Reorganização Curricular do Ensino Básico vem criar as condições necessárias à articulação entre as temáticas da Física e da Química e os conceitos abordados, esbatendo assim a sua compartimentação e facilitando o desenvolvimento de uma linguagem comum; todavia, tal situação ainda não se verifica nos novos programas do Ensino secundário.

Embora possam e devam surgir certamente outras ideias relevantes, gostaríamos de sugerir duas estratégias que têm vindo a ser utilizadas em vários países com algum sucesso:

- A primeira, é a construção e reconstrução, na sala de aula, de um glossário único para Química e Física (e, se possível, englobando outras ciências), com base na verbalização dos conceitos efectuada pelos próprios alunos e corrigida pelo professor. Esse aspecto da verbalização é extremamente importante para o processo de aprendizagem do aluno, não só porque é parte activa na construção conceptual, como também porque se revê na linguagem usada no glossário e, deste modo realiza uma aprendizagem significativa (Arons, 1997).
- A segunda, é a já tradicional elaboração de mapas conceptuais, mas desta vez interligando as unidades didácticas

de Química e Física, e eventualmente de outras ciências afins. Um exemplo de utilização construtivista dos mapas conceptuais é o trabalho realizado por Sansão, Castro e Pereira (2002) em que esta ferramenta é usada para avaliar a evolução conceptual dos alunos, comparando o seu desempenho antes e após a leccionação de uma unidade didáctica, antes e após a interacção com outros alunos.

### Referências:

- Arons, A.B.**, *Teaching Introductory Physics*, John Wiley Sons, Inc., 1997
- Lee, C.D., Smagorinsky, P. (ed.)**, *Vygotskian Perspectives on Literacy Research*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000
- Leite, M.S., Almeida, M.J.**, Compreensão de Termos Científicos no Discurso da Ciência, *Revista Brasileira de Ensino da Física*, **23** (4) (2001) 458-470
- Sansão, M.O., Castro, M.L, Pereira, M.P.**, *Mapa de Conceitos e Aprendizagem dos Alunos*, IIE – <http://www.iie.min-edu.pt>, Biblioteca Digital (02-12-2002)
- Sutton, C.**, *Words, Science and Learning*, Open University Press, Buckingham, 1992
- Vigotski, L.S.**, *Pensamento e Linguagem*, Martins Fontes, São Paulo, 1987
- Wellington, J., Osborne, J.**, *Language and Literacy in Science Education*, Open University Press, Buckingham, 2001

# Agora em Português!

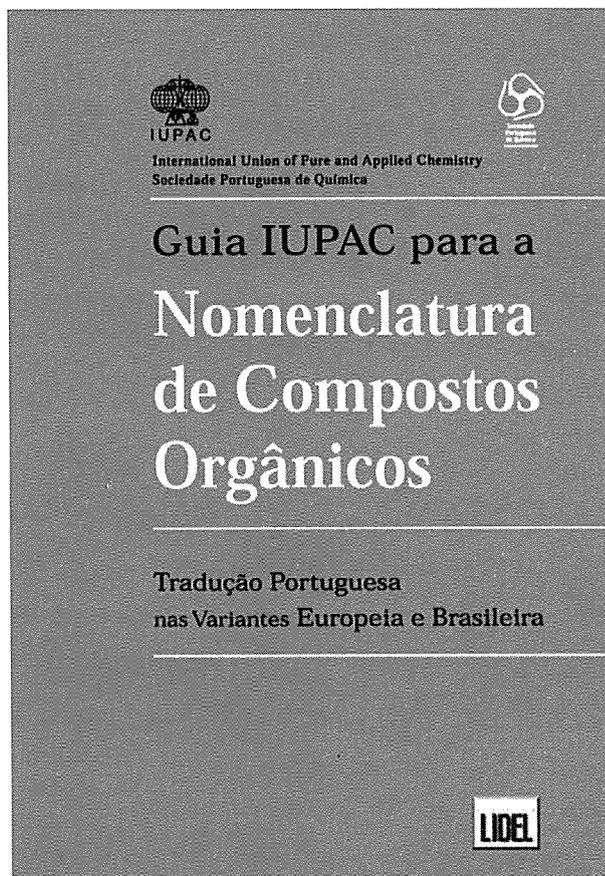
## Um livro de referência para todos os Químicos!

Porque é necessário saber identificar uma espécie química por meio de uma palavra escrita ou pronunciada;

Para que o leitor, ou simplesmente o ouvinte, possa deduzir a estrutura a partir do nome, os nomes dos compostos devem ter tanta relação quanto possível com as suas estruturas;

E como tudo isto requer um sistema de princípios e de regras, cuja aplicação dá origem a uma nomenclatura sistemática,

Aparece, agora em PORTUGUÊS, o Guia IUPAC para a Nomenclatura de Compostos Orgânicos que actualiza o conjunto de regras contidas na última edição de *Nomenclature of Organic Chemistry* e permite ao utilizador criar nomes correctos, na nossa língua, adaptados a cada caso particular.



RESULTADO DE UM EXAUSTIVO  
TRABALHO DE CONSULTA

REVISTO POR INÚMERC  
ESPECIALISTAS NACIONAIS

### Tradutores

- Ana Cristina Fernandes - Universidade Lusófona de Humanidades e Tecnologias de Lisboa
- Bernardo Herold - Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa
- Hernâni Maia - Universidade do Minho
- Amélia Pilar Rauter - Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa
- José Augusto Rosário Rodrigues - Universidade Estadual de Campinas do Estado de São Paulo

ADAPTADO À LÍNGUA PORTUGUESA

Inclui referência à variante brasileira sempre que esta seja diferente da europeia

LIDEL - Edições Técnicas, Lda  
Www.lidel.pt • E-mail: [promocao@lidel.pt](mailto:promocao@lidel.pt)  
Lisboa: 213541448 • Porto: 225097993/5 • Coimbra: 239822486



# O Big Crunch do Ensino da Química

CARLOS CORRÊA \*

Agora que o novo Programa Oficial de Química do 10.º ano foi experimentado nas Escolas e escritos os correspondentes manuais escolares, é tempo de se dizerem algumas verdades sobre tão monstruoso programa.

Quando o actual Governo entrou em funcionamento suspendeu este (e outros) programas e esperava-se que esse sinal de competência e equilíbrio tivesse continuidade, mas verificou-se exactamente o contrário. Como um medicamento fora de prazo que custou dinheiro e tem de ser tomado mesmo quando o paciente dele não necessita, o clamor de alguns livreiros em relação ao dinheiro já investido na elaboração dos livros levou o Governo a transferir a factura para os pais dos alunos, os pais das eternas cobaias do nosso sistema educativo.

O Programa de Química do 10.º ano assenta na demagogia da constante referência à cidadania, à cidadania democrática, com ideias muito bonitas (certamente transferidas dos manuais das Ciências da Educação que já cá chegaram...) como as que se transcrevem "... *consolidação de saberes no domínio científico que confira competências de cidadania, que promova igualdade de oportunidades e que desenvolva em cada aluno um quadro de referência, de atitudes, de valores e de capacidades que o ajudem a crescer a nível pessoal, social e profissional*"

Estas belas intenções, aliadas à ideia de "interdisciplinaridade", que frisa "a necessidade de escolha de situações-pro-

blema, familiares aos alunos" e termina com a mensagem "que há que ensinar menos para ensinar melhor", conduziu imediatamente ao Big Bang (Das Estrelas ao Átomo)...

Não se percebe a razão de os físicos não terem incluído estes assuntos no programa de Física e terem deixado para a Química tão delicado assunto.

Esta entrada abusiva e incompreensível da Astrofísica no ensino da Química não tem nenhuma razão de ser e vai claramente contra as intenções escritas de "ensinar menos para ensinar melhor." Era vulgar, nos nossos manuais de Química para o 10.º ano, inserir leituras complementares de divulgação de alguns destes aspectos, o que é completamente diferente de incluir esses tópicos no programa obrigatório.

Conta-se a história, passada num colégio, em que o professor, depois de referir que "no Big Bang ocorreu uma violenta explosão a partir do nada" (seguindo o manual que adoptaram), um aluno mais sabedor perguntou ao professor "como era isso possível, dado o princípio da conservação da massa-energia?" O professor ficou um pouco entalado, mas logo um outro aluno, formado em "cidadania", ajudando o professor, deu a resposta ao colega: "Não vês que nessa época ainda não tinha sido descoberto esse princípio!" Este professor e este aluno mostraram ter assimilado perfeitamente as directrizes do programa "ensinar melhor a pensar,...,ensinar melhor a aprender," e "compreender a importância das ideias

centrais, tais como as leis de conservação"... A história termina com a intervenção de um terceiro aluno que, muito sensatamente, diz: "Se foi uma explosão a partir do nada, não seria melhor deixar que fosse Deus a criar o Universo?"

Não tarda que outros assuntos em moda apareçam nos programas, nomeadamente a teoria das cordas, a relatividade, a matéria negra e a energia negra... Compete aos professores de Química dar respostas a estes alunos...

Sem se saber a razão, a noção de *frequência da radiação* foi eliminada do programa, ficando tudo reduzido a energia. Na realidade esta noção "transcendente" tinha de ser eliminada, até porque os alunos nunca ouviram falar em frequências das estações de rádio, nem em megaciclos! Fala-se num Universo em expansão e no deslocamento para o vermelho, mas proíbem-se explicitamente as noções de frequência e comprimento de onda... Será que este desvio para o vermelho quer dizer "deslocamento para a esquerda"?

Na segunda Unidade viaja-se pela atmosfera, percorrendo as diferentes "camadas" para chegar às tais insignificantes moléculas de oxigénio, de azoto, de dióxido de carbono que nos rodeiam e penetram, e à molécula de água que forma mais de 60 % do que nós somos!

A Química parece algo de acessório, algo que está longe de nós, pois é necessário ir às estrelas e à termosfera para chegar aos elementos que nos constituem...

\*Professor Catedrático de Química da Universidade do Porto, Departamento de Química da FCUP, E-mail: ccorrea@fc.up.pt

O mais curioso é que, depois desta caminhada pelo espaço e pelo tempo e passagem através da atmosfera, se apresenta praticamente toda a Química do anterior 10.º ano, sem esquecer os números quânticos, as orbitais, as configurações electrónicas, o princípio da energia mínima e da exclusão de Pauli e a regra de Hund. Também a Tabela Periódica é desenvolvida, praticamente, na mesma extensão que tinha no antigo programa.

Foi necessário percorrer todas as camadas da atmosfera (estudando a variação da temperatura e pressão) para entrar nos colóides, nos radicais livres, na interacção da radiação com a matéria, na destruição da camada de ozono, no modelo da ligação covalente (esqueceram a iónica), nos parâmetros de ligação, nas fórmulas de Lewis, na geometria molecular e numa introdução à nomenclatura química.

Esqueceram a mole, aquele prato forte de uma certa Química, mas não esqueceram o volume molar, a massa molar, a fracção molar, a energia de ligação por mole..., sendo a ideia de mole certa-

mente considerada adquirida. No programa do 11.º ano, porém, inclui-se a noção de mole... porque não era conhecida.

O papel da experimentação é realçado no programa e exige-se um laboratório equipado para o efeito e a presença de um Técnico de Laboratório em tempo inteiro... o que nunca sucedeu. As competências (do tipo processual, do tipo conceptual e do tipo social, atitudinal e axiológico...) a desenvolver pelos alunos através da preparação, realização e avaliação de actividades práticas, e que se espera terem sido conseguidas até ao final do 11.º ano, consta de uma extensa e irrealista lista com 23 competências (vale a pena consultá-la), muitas delas duvidosas mesmo a nível de pessoal altamente qualificado.

Em resumo, quem tiver a paciência de analisar o Programa e experimentar a sua execução na sala de aula verifica que esse Programa Oficial é constituído por uma série ambiciosa, bonita e politicamente correcta de intenções que, na prática, levam exactamente ao oposto do que se pretende.

Ensina-se mais, ensina-se pior, não se desenvolve o espírito crítico (querem pôr as crianças a discutir a origem do Universo?) nem se avança no ensino experimental.

Será que isto vai mudar?

Ao vermos o comportamento do Ministério em relação ao regime opcional da Química e Física do 10.º ao 12.º ano, não se espera que sejam capazes de fazer melhor. Neste país parece não haver Químicos; há certamente muita gente a dizer como se ensina Química...

#### Nota:

As transcrições em itálico foram retiradas de:

1. Programa de Física e Química A – 10.º Ano, Ministério da Educação, Departamento de Ensino Secundário, homologação 12-03-2001
2. Programa de Física e Química A – 11.º Ano, Ministério da Educação, Departamento de Ensino Secundário, homologação 2-04-2003



**APCER**  
Certificado  
de Conformidade  
Certificate of Registration

End.  
Rua de São Pedro  
R. de São Pedro, 15, 1500-207 Lisboa  
Tel. 21 716 5169  
Fax. 21 716 5169

NÚMERO/Number **96/CEP.410**

A Associação Portuguesa de Certificação (APCER)  
The Portuguese Association for Certification (APCER)  
certifica que o sistema da qualidade da  
certifies that the quality system of

**SOQUÍMICA – SOCIEDADE DE REPRESENTAÇÕES DE QUÍMICA, LDA.**  
Rua Coronel Santos Pedroso, 15  
1500 - 207 LISBOA  
PORTUGAL

Implementado na comercialização, manutenção e calibração de equipamentos de laboratório, cumpre os requisitos da  
implemented in the supply, servicing and calibration of laboratory equipment, meets the requirements of

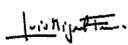
**NP EN ISO 9002:1995**

Sistemas da Qualidade. Modelo de garantia da qualidade na produção, instalação e assistência pós-venda.  
Quality Systems. Model for quality assurance in production, installation and servicing

O presente certificado é emitido no âmbito do Sistema Português da Qualidade.  
This certificate is issued within the Portuguese System for Quality

Data de emissão/Date of issue 1999-06-18

Válido até/Valid until 2002-06-17



Luis Fonseca  
Director Geral/General Director



**SOQUÍMICA**  
Sociedade de Representações de Química, Lda

R. Coronel Santos Pedroso 15 · 1500-207 Lisboa **Tel 21 716 5160 · Fax 21 716 5169**  
R. 5 de Outubro 269 · 4100-175 Porto **Tel 22 609 3069 · Fax 22 600 0834**  
E-mail: [soquimica@mail.telepac.pt](mailto:soquimica@mail.telepac.pt) [www.soquimica.pt](http://www.soquimica.pt)

#### IV Forum Internacional dos Investigadores Portugueses

Ciências Básicas e Engenharias (Robótica): Investigação, Ensino e Impacto na Sociedade

12–14 Julho 2004 em Coimbra, Portugal

Entre 12 e 14 de Julho de 2004 vai ter lugar no Auditório da Reitoria da Universidade de Coimbra o IV Fórum Internacional de Investigadores Portugueses, co-organizado pelo Instituto de Investigação Interdisciplinar.

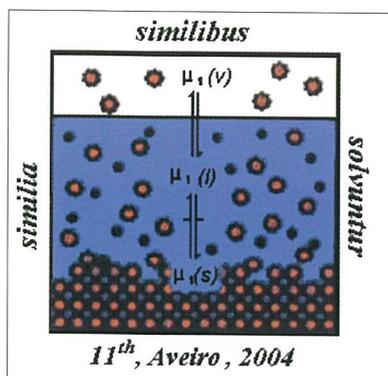
URL: [www.uc.pt/forum](http://www.uc.pt/forum)

#### 11th International Symposium on Solubility Phenomena, Including Related Equilibrium Processes (11th ISSP)

25–29 Julho 2004, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal

Vai realizar-se na Universidade de Aveiro o 11.º Simpósio Internacional sobre Fenómenos de Solubilidade incluindo Processos de Equilíbrio Relacionados organizado pela Subcomissão da IUPAC de Solubilidade e Equilíbrio e conta com o apoio da própria IUPAC, da Sociedade Portuguesa de Química e da Universidade de Aveiro. Este simpósio de periodicidade bienal realiza-se desde 1984 em vários países de África, Ásia, Europa e Américas do Norte e do Sul. Os dois últimos realizaram-se na Tunísia (Hamamet) e na Bulgária (Varna).

Os fenómenos de solubilidade e outros processos de equilíbrio são temas de relevância especial com aplicações em processos relacionados com o quotidiano, o ambiente, os seres vivos e a indústria.



Os objectivos principais deste simpósio são: discutir os desenvolvimentos recentes na química dos fenómenos de solubilidade e processos de equilíbrio com eles relacionados, e as suas aplicações à indústria química e bioquímica, ambiente, agricultura, saúde, salmouras e aos efluentes industriais e mineiros; aumentar a cooperação científica a nível internacional com uma participação de investigadores de todo o mundo; atrair a participação de jovens para o estudo da solubilidade; aumentar o interesse pelos fenómenos de solubilidade promovendo experiências e um debate sobre as suas aplicações ao ensino nos níveis básico, secundário e universitário; e publicitar as actividades da IUPAC nesta área. Este Simpósio é um dos primeiros em que se pretende dar ênfase aos aspectos educacionais desta questão. Sendo um encontro internacional a língua oficial será o inglês mas realizando-se em Portugal a organização gostaria de ter a participação de professores dos Ensinos Básico e Secundário.

Os tópicos principais cobertos neste simpósio e alguns dos conferencistas convidados: *Chemical speciation* (Rita Delgado), *Solution thermodynamics* (U. Domanska-Zelazna, G. Hefter), *Solubility data and Computer modeling* (K. Thomsen, J. Vanderdeelen), *Polymers and nonelectrolytes* (J. P. Grolier, M. Costa-Gomes, E. Macedo), *Solubility in supercritical fluids* (D. Knox), *Geochemical and environmental applications* (P. A. Williams), *Biomedical applications* (I. Marrucho), *Teaching aspects of solubility phenomena* (M. Hugerat). A publicação recente do livro "The Experimental Determination of Solubilities" originará uma sessão de debate com os editores (G. Hefter and R. P. T. Tomkins) e alguns dos seus co-autores. Esta sessão será especialmente destinada a estudantes de doutoramento e todos aqueles que queiram conhecer melhor as técnicas de determinação de solubilidade.

E: [issp@dq.ua.pt](mailto:issp@dq.ua.pt),

URL: [www.dq.ua.pt/11th\\_issp](http://www.dq.ua.pt/11th_issp)

#### European Conference on Analytical Chemistry – Euroanalysis XIII

5–10 Setembro 2004 em Salamanca, Espanha

A Euroanalysis XIII é organizada pela Sociedade Espanhola de Química Analítica em cooperação com o departamento de Química Analítica, Nutrição e Ciência Alimentar da Universidade de Salamanca, sendo orientado à participação de jovens cientistas. A reunião deste ano será dedicada ao tópico "O papel da química analítica na protecção dos cidadãos", incluindo o programa científico lições plenárias, contribuições orais e em poster focando temas como o impacto da Química Analítica na qualidade de vida, novas ferramentas e processos analíticos e análise alimentar.

E: [jhm@usal.es](mailto:jhm@usal.es)

URL: [www.euroanalysis13.com](http://www.euroanalysis13.com)

#### XXIX Reunião Ibérica de Adsorção

15–17 Setembro 2004 no Porto, Portugal

A Delegação do Porto da Sociedade Portuguesa de Química, em colaboração com o Laboratório de Catálise e Materiais / Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto e o REQUIMTE / Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, vão organizar a XXIX Reunião Ibérica de Adsorção, que se realiza no Porto, de 15 a 17 de Setembro de 2004. O historial deste evento remonta ao ano de 1976, em que se celebrou a "I Reunión Nacional de los Grupos de Trabajo Relacionados con la Investigación en el Campo de la Adsorción", na Universidade de Granada. Na III Reunión, celebrada em Oviedo em 1978, participou já uma numerosa delegação Portuguesa, o que esteve na origem da posterior mudança de designação para "Reunião Ibérica de Adsorção". Celebraram-se em Portugal a V Reunião (Lisboa, 1980), a X (Porto, 1985), a XVIII (Lisboa, 1993) e a XXIII (Évora, 1998).

Estas Reuniões têm uma periodicidade anual e juntam cerca de 100 investigadores e estudantes de pós-graduação de Portugal e de Espanha com interes-

ses científicos na área da adsorção, sendo o programa distribuído por conferências convidadas, comunicações orais e em poster. A reunião deste ano contará com a presença do Professor Ljubisa Radovic da Pennsylvania State University, uma personalidade de renome na área de adsorção, nomeadamente no uso de materiais de carbono na prevenção da poluição do ar e da água.

Até 15 de Julho poderá ainda efectuar a sua inscrição sem sobretaxa.

E: xxixria@fe.up.pt,  
URL: www.fe.up.pt/xxixria

#### VII Jornadas de Carbohidratos

16–18 Setembro 2004 em Tarragona, Espanha

De 16 a 18 de Setembro irá realizar-se em Tarragona, as VII Jornadas de Carbohidratos, uma reunião bienal da divisão de hidratos de carbono da Real Sociedade Espanhola de Química, este ano organizadas pelo grupo de Síntese Orgânica Estereoselectiva e Química de Carbohidratos da Universidade Rovira i Virgili. Estas jornadas têm suscitado um crescente interesse por parte de investigadores na área da Química e da Bioquímica de carbohidratos. Dois destes encontros foram organizados em conjunto com a SPQ, tendo assumido desta forma um natural carácter Ibérico.

E: castillon@quimica.urv.es,  
URL: www.quimica.urv.es/carb2004

#### 9th Chemometrics in Analytical Chemistry Conference

20–23 Setembro 2004 em Lisboa, Portugal

Entre 20 e 23 de Setembro irá realizar-se em Lisboa a 9th International Conference in Analytical Chemistry. Seguindo a tradição das conferências anteriores, será dado ênfase a novos desenvolvimentos e aplicações da quimiometria nas áreas das biociências, química, engenharia química e de processos, alimentar, ambiental e farmacêutica.

A quimiometria surgiu nos anos oitenta e pode ser definida como a ciência que relaciona medições realizadas num sistema ou processo químico com o estado do sistema, através da aplicação de métodos matemáticos ou estatísticos, permitindo a previsão ou selecção dos procedimentos de medida óptimos ou experiências a realizar para retirar a máxima informação dos dados adquiridos.

As conferências de quimiometria têm uma periodicidade bienal e revestem-se de uma atmosfera particular, devido não só à presença habitual da maioria dos fundadores da disciplina, mas também devido a outros dois factores. O primeiro tem a ver com a presença equilibrada de cientistas, técnicos e afiliados da academia e da indústria em todos os encontros. O segundo factor resulta do programa de trabalhos, repartido de uma forma equilibrada entre lições plenárias, comunicações orais, tempo para questões e bastante tempo para discussões nas sessões de posters, permitindo o conhecimento e a troca de experiên-

cias e informações sobre quimiometria entre praticantes jovens e seniores.

Em 2004 o tema da conferência será "Novos Desafios para uma Ciência em Maturação".

E: cac2004@ist.utl.pt,  
URL: dequim.ist.utl.pt/cac2004

#### Simpósio em Corantes e Pigmentos Orgânicos

12 e 13 de Novembro de 2004 em Vila Real, Portugal

À semelhança do que tem vindo a ser feito nos últimos anos, a Divisão de Química Orgânica (Presidente e Vice-Presidentes actuais: Ana M.F.O. Campos, Luís H. Melo de Carvalho e Amadeu Brigas) da Sociedade Portuguesa de Química tomou a iniciativa de organizar um Simpósio sobre "Corantes e Pigmentos Orgânicos", que está previsto para os dias 12 e 13 de Novembro na Universidade de Trás os Montes e Alto Douro. Estão a efectuar-se contactos no sentido

dynea

UNIVERSITÄT WIEN

phopoc

2<sup>nd</sup> European Students Conference  
on

Physical, Organic,  
&  
Polymer Chemistry

Vienna, 15-17 September 2004

This 3-days conference gives students and PhD. students the opportunity to present and discuss their results with experts from both university and industry, leaving enough time for a sightseeing tour and some great parties!

For more Information see: <http://www.phopoc.com> or contact us at: [info@phopoc.com](mailto:info@phopoc.com)

de obter a contribuição de oradores nacionais e estrangeiros, pretendendo-se abranger um leque alargado de tópicos de grande interesse nesta área: fenómenos crómicos, corantes naturais e sintéticos, corantes funcionais, compostos fotocrómicos, corantes para aplicações médicas, etc. Simultaneamente este Simpósio será um local privilegiado de encontro e debate de temas de interesse comum para estudantes, investigadores e professores desta área científica.

No primeiro dia do Simpósio haverá duas conferências plenárias por especialistas estrangeiros, comunicações orais por investigadores portugueses e também uma sessão de posters. A maior parte das comunicações orais são convidadas, tendo-se deixado intervalos

para duas comunicações mais curtas, que serão escolhidas após a análise dos resumos submetidos.

No dia 13 prevêem-se duas sessões experimentais para um número limitado de participantes, e especialmente destinadas a Professores do Ensino Secundário, sobre "A Cor nos Têxteis: pH e cationisadores" e "Fotografia. Da prata aos bits".

Uma primeira circular (onde se indicará o Programa Científico para os dois dias, a constituição das Comissões Científica e Organizadora Local, as normas e prazos para envio dos resumos e de inscrição) será enviada até fim de Julho de 2004, a todos os membros da Divisão de Química Orgânica e a todos aqueles que enviarem uma cópia da respectiva

ficha, para a morada indicada. Prevê-se que a data limite para aceitação de resumos de comunicações seja 15 de Setembro.

E: [Icarv@utad.pt](mailto:Icarv@utad.pt),  
[amcampos@quimica.uminho.pt](mailto:amcampos@quimica.uminho.pt)

---

### 2nd European Students Conference

on Physical, Organic &

Polymer Chemistry

15 a 17 de Setembro em Vienna, Austria

URL: [isp.epfl.ch/page32068.html](http://isp.epfl.ch/page32068.html)

---

Secção compilada por Helder Gomes

## Agenda

### 11–16 Julho 2004 em Paris, França

13th International Congress on Catalysis (13ICC)

E: [13icc2004@colloquium.fr](mailto:13icc2004@colloquium.fr),

URL: [www.13icc.jussieu.fr](http://www.13icc.jussieu.fr)

---

### 12–14 Julho 2004 em Coimbra, Portugal

IV Forum Internacional dos Investigadores Portugueses – Ciências Básicas e Engenharias (Robótica): Investigação, Ensino e Impacto na Sociedade  
URL: [www.uc.pt/forum](http://www.uc.pt/forum)

---

### 17–22 Julho 2004 em Granada, Espanha

20th IUPAC Symposium on Photochemistry

E: [mmiranda@qim.upv.es](mailto:mmiranda@qim.upv.es)

URL: [www.ugr.es/~xxiupacs/iupacxx.htm](http://www.ugr.es/~xxiupacs/iupacxx.htm)

### 18–20 Julho 2004 em Lausanne, Suíça

International Symposium on Carbon for Catalysis (CarboCat)

E: [carbocat@epfl.ch](mailto:carbocat@epfl.ch)

URL: [isp.epfl.ch/page32068.html](http://isp.epfl.ch/page32068.html)

---

### 18–23 Julho 2004 em Praga, República Checa

11th International Conference on Polymers and Organic Chemistry (POC04)

E: [kjer@icpf.cas.cz](mailto:kjer@icpf.cas.cz),

URL: [poc04.icpf.cas.cz](http://poc04.icpf.cas.cz)

---

### 23–27 Julho 2004 em Glasgow, Escócia

22nd International Carbohydrate Symposium (ICS22)

E: [e.hounsell@bbk.ac.uk](mailto:e.hounsell@bbk.ac.uk),

URL: [www.rsc.org/lap/confs/ICS22.htm](http://www.rsc.org/lap/confs/ICS22.htm)

### 25–29 Julho 2004 em Aveiro, Portugal

11th International Symposium on Solubility Phenomena, Including Related Equilibrium Processes (11th ISSP)

E: [issp@dq.ua.pt](mailto:issp@dq.ua.pt),

URL: [www.dq.ua.pt/11th\\_issp](http://www.dq.ua.pt/11th_issp)

---

### 25–30 Julho 2004 em Vancouver, Canadá

21st International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC)

E: [registration@housing.ubc.ca](mailto:registration@housing.ubc.ca),

URL: [www.conferences.ubc.ca/xxi\\_icomc](http://www.conferences.ubc.ca/xxi_icomc)

---

### 1–6 Agosto 2004 em Nagoya, Japão

15th International Conference on Organic Synthesis (ICOS–15)

E: [icos@ics-inc.co.jp](mailto:icos@ics-inc.co.jp),

URL: [www.ics-inc.co.jp/icos15](http://www.ics-inc.co.jp/icos15)

**3–8 Agosto 2004 em Istambul,  
Turquia**

18th International Conference on Chemical Education (18th ICCE)  
E: icce2004@marmara.edu.tr  
URL: [www.turchemsoc.org/icce/web/](http://www.turchemsoc.org/icce/web/)

**17–21 Agosto 2004 em Beijing, China**

18th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics (ICCT2004)  
E: qiuxb@info3.icas.ac.cn,  
URL: [chem.tsinghua.edu.cn/ICCT2004](http://chem.tsinghua.edu.cn/ICCT2004)

**20–25 Agosto 2004 em Shanghai,  
China**

7th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-7)  
E: ICHAC@pub.sioc.ac.cn,  
URL: [www.sioc.ac.cn/ICHAC-7](http://www.sioc.ac.cn/ICHAC-7)

**22–26 Agosto 2004 em Praga,  
República Checa**

16th International Congress of Chemical and Process Engineering (CHISA2004)  
E: org@chisa.cz,  
URL: [www.chisa.cz/2004](http://www.chisa.cz/2004)

**22–28 Agosto 2004 em Beijing,  
China**

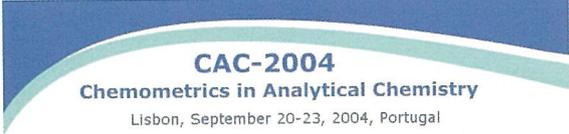
International Symposium on Biological Polyesters (ISBP 2004)  
E: chengq@mail.tsinghua.edu.cn  
URL: [microbes.biosci.tsinghua.edu.cn/ISBP/](http://microbes.biosci.tsinghua.edu.cn/ISBP/)

**4–9 Setembro 2004 em San Feliu de  
Guixols, Espanha**

EuroConference on New Theoretical and Spectroscopical Approaches to Inorganic Chemistry Problems  
E: aguehl@esf.org,  
URL: <http://www.esf.org>

**5–10 Setembro 2004 em Salamanca,  
Espanha**

European Conference on Analytical Chemistry – Euroanalysis XIII  
E: jhm@usal.es,  
URL: [www.euroanalysis13.com](http://www.euroanalysis13.com)



**CAC-2004**  
**Chemometrics in Analytical Chemistry**  
Lisbon, September 20-23, 2004, Portugal  
<http://dequim.ist.utl.pt/cac2004>

9th Chemometrics in Analytical Chemistry Conference  
20-23 September 2004, Lisbon (Portugal)

Prof. José Cardoso de Menezes (IST-UTL) & Prof. Joaquim Esteves da Silva (FC-UP)  
CAC-2004 Executive Chairmen

voice: (+351) 21 841 9838, fax: (+351) 21 841 9197, [cac2004@ist.utl.pt](mailto:cac2004@ist.utl.pt)  
Centre for Biological & Chemical Engineering  
IST, Av. Rovisco Pais, 1049-001, Lisbon, Portugal

Organizado com o patrocínio de



**SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA**





**Xarxa Catalana de Quimiometria**



**Instituto Superior Técnico**

**FCT** Fundação para a Ciência e a Tecnologia  
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E DO ENSINO SUPERIOR Portugal

**5–11 Setembro 2004 em Mérida,  
Yucatán, México**

XIX Simpósio Ibero-americano de Catálise (XXIXSICAT)  
E: [ibero04@correo.azc.uam.mx](mailto:ibero04@correo.azc.uam.mx),  
URL: <http://www.xixsicat.org/>

**15–17 Setembro 2004 em Vienna,  
Áustria**

2nd European Students Conference on Physical, Organic & Polymer Chemistry (PHOPOC)  
E: [info@phopoc.com](mailto:info@phopoc.com),  
URL: [www.phopoc.com](http://www.phopoc.com)

**15–17 Setembro 2004 no Porto,  
Portugal**

XXIX Reunião Ibérica de Adsorção  
E: [xxixria@fe.up.pt](mailto:xxixria@fe.up.pt),  
URL: [www.fe.up.pt/xxixria](http://www.fe.up.pt/xxixria)

**16–18 Setembro 2004 em Tarragona,  
Espanha**

VII Jornadas de Carbohidratos (Carb2004)  
E: [castillon@quimica.urv.es](mailto:castillon@quimica.urv.es),  
URL: [www.quimica.urv.es/carb2004](http://www.quimica.urv.es/carb2004)

**19–22 Setembro 2004 em Santiago  
de Compostela, Espanha**

II Reunión Bienal del Grupo de RMN de la RSEQ  
URL: [desoft03.usc.es/bienal.asp](http://desoft03.usc.es/bienal.asp)

**20–23 Setembro 2004 em Lisboa,  
Portugal**

9th Chemometrics in Analytical Chemistry Conference (CAC2004)  
E: [cac2004@ist.utl.pt](mailto:cac2004@ist.utl.pt),  
URL: <http://dequim.ist.utl.pt/cac2004/>

**29 Outubro-1 Novembro 2004 em  
Lisboa, Portugal**

3rd Portuguese-Spanish Biophysics Congress  
URL:  
[http://www.itqb.unl.pt/congress\\_biophysics](http://www.itqb.unl.pt/congress_biophysics)

**12–13 Novembro 2004 em Vila Real,  
Portugal**

Simpósio em Corantes e Pigmentos Orgânicos  
E: [icarv@utad.pt](mailto:icarv@utad.pt),  
[amcampos@quimica.uminho.pt](mailto:amcampos@quimica.uminho.pt)