

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Propriedade de
Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870 – 1180
Registo na ERC n.º 125 525
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 116, Janeiro – Março 2010

Redacção e Administração
Av. da República, 45 – 3.º Esq.
1050-187 LISBOA
Tel.: 217 934 637
Fax: 217 952 349
bquimica@ist.utl.pt
www.spq.pt

Editor
Jorge Morgado

Editores-Adjuntos
Palmira Silva
Helder Gomes
Carlos Folhadela

Comissão Editorial
Hugh Burrows
Joaquim L. Faria
Ana Lobo
M. N. Berberan e Santos
A. Nunes dos Santos

Publicidade
Leonardo Mendes
Tel.: 217 934 637
Fax: 217 952 349
leonardo.mendes@spq.pt

Grafismo
Paula Martins

Execução Gráfica
Tipografia Lousanense
Rua Júlio Ribeiro dos Santos - Apartado 6
3200-901 Lousã - Portugal
Tel.: 239 990 260
Fax: 239 990 279
geral@tipografialousanense.pt

Tiragem
1850 exemplares

Preço avulso
€ 5,00
Assinatura anual – quatro números
€ 18,00
(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
deste fascículo.

Publicação subsidiada pela

FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E ENSINO SUPERIOR

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

EDITORIAL 2

NOTICIÁRIO SPQ

Um Novo Capítulo	3
Balanço do Mandato 2007-2009	4
Inquérito SPQ	14
Semifinais das Olimpíadas de Química*	17
Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química* 2010	19
Grupo de Químicos Jovens – 2 anos de actividades e o futuro	20
<i>European Young Chemists Network</i> <i>5th Delegate Assembly</i>	21
Notícia da Divisão de Química Analítica	21

QUÍMICA E ENSINO

Cristalização: uma aplicação em decoração	23
<i>Ana Tavares Sousa</i>	

CONFERÊNCIAS

<i>2nd Portuguese Young Chemists Meeting</i>	27
---	----

ARTIGOS

A Química no Cérebro	29
<i>Raquel B. Dias</i>	
Levantamento da Produção Científica Mundial e Ibérica no Campo dos Nanotubos de Carbono	33
<i>Ricardo Silva, Margarida Amaral, Diogo Mata, Rui F. Silva, Pedro M. F. J. Costa</i>	

DESTAQUES 48

AGENDA 52



JORGE MORGADO
 bqumica@ist.utl.pt
 www.spq.pt

Este número marca a passagem de testemunho a um novo Editor e equipa editorial do Química. É pois tempo de balanço, do que procurámos e do que conseguimos fazer. Das intenções e das concretizações!

Ao longo de cerca de três anos procurámos que o Química funcionasse como veículo de informação, identificando os membros da SPQ que partilham pelo menos dois interesses: o gosto pela Química (nas suas várias vertentes) e a vontade em assegurar uma dinâmica nesta área científica que tem sido descurada pela tutela enquanto área de formação ao nível do Ensino Secundário. Todos sentimos que à Química são atribuídos todos os problemas resultantes do seu mau uso ou das consequências (em particular ambientais) não antecipadas. Não há, por outro lado, o reconhecimento por parte da Sociedade da sua real importância (boa e má!) na qualidade de vida actual. Se o progresso do conhecimento e o desenvolvimento tecnológico podem ter consequências ou implicações não antecipadas atribuídas à Química, só a Química poderá resolvê-las, como dizia o saudoso Prof. Alberto Romão Dias. É nitidamente descabida a ideia de que se pode viver sem a Química. Para tal basta que se pense sobre as áreas em que ela intervém no nosso dia-a-dia. E aqui, penso que temos que ser nós, com iniciativas a vários níveis, a enquadrar o papel da Química na Sociedade. Porventura, a forma mais adequada e eficiente de o fazer, é através de uma correcta informação/formação dos nossos jovens alunos, a quem sejam mostradas as várias vertentes da Química.

A crise que se viveu, a nível da formação, com a redução da procura e interesse nesta área foi geral no Mundo Ocidental e parece começar a inverter-se. A formação, ao nível do Ensino Secundário, marcada por alguns chavões recentes, parece ter evoluído não no sentido da formação em áreas básicas do conhecimento (excepção seja feita ao empenho posto no ensino da Língua Portuguesa e da Matemática) mas antes numa formação mais generalista, procurando tornar o ensino mais “motivador” (enquadrado na preocupação de limitar o abandono escolar) o que por

vezes se tem conseguido à custa da exposição de perspectivas que, no mínimo, são parciais.

É evidente que o paradigma do ensino mudou nos últimos tempos. Não apenas pela evolução e disponibilização de meios tecnológicos e num acesso quase ilimitado à informação (embora ainda não acessível a todos) mas também pela diversificação dos interesses dos nossos jovens. A isto acresce uma visão muito lusa em que pouco se tem valorizado a cultura do mérito.

Neste número é apresentado o balanço da Direcção da SPQ cessante, pelo Prof. Paulo Claro, e uma mensagem do novo Secretário-Geral da SPQ, o Prof. Joaquim Faria.

As Olimpíadas de Química são as actividades de maior visibilidade da SPQ junto dos alunos e Professores do Ensino Secundário. Aqui deixamos o relato da forma como decorreram as meias finais das Olimpíadas de Química*.

Neste número queria chamar a atenção para dois artigos, um sobre a Química no cérebro, mais concretamente sobre o papel do glutamato como neurotransmissor, e um outro sobre a produção científica mundial e ibérica no campo dos nanotubos de carbono, e ainda sobre uma actividade de laboratório sobre a integração da cristalização no fabrico de velas de gel.

Um conjunto de actualidades científicas completa este número que, espero, achem interessante.

O Química, para se manter activo, necessita do empenho de todos os sócios e amantes da Química. Nos últimos tempos tem havido um decréscimo das contribuições espontâneas, o que poderá dever-se a um défice de motivação. Neste momento de transição apelo aos sócios em particular para que assumam um papel mais activo, enviando notícias, artigos de opinião ou divulgação, de forma a manter vivo este projecto.

Aqui deixo os votos de sucesso para a nova
 equipa Editorial

Boa leitura!

Um Novo CAPÍTULO

No dia 6 de Janeiro foi escolhida a nova direcção da SPQ para o triénio 2010-2012. A eleição dos actuais corpos gerentes fez-se em Assembleia Geral convocada para o efeito, seguindo os procedimentos estatutários estabelecidos.

Todo o ambiente que rodeou esta passagem de testemunho foi de grande serenidade, característico de uma instituição quase centenária que se tem sabido gerir autonomamente, seguindo um caminho próprio, sem servilismos, nem procurando o sensacionalismo mediático.

Com maior ou menor visibilidade, a SPQ tem prosseguido a missão que se propôs realizar e tornou pública na cerimónia de inauguração da então nova sede, na Av. da República, em 24 de Fevereiro de 1977: constituir um centro de debate franco e cordial que estimule e promova o contacto entre os seus membros de forma a contribuir para o desenvolvimento da investigação e para um melhor ensino da Química. São estes os objectivos que ainda hoje figuram nos Estatutos.

Em 2009, por força das circunstâncias, a SPQ (com as outras 3 socie-

dades científicas que partilhavam os espaços da Av. da República) viu-se obrigada a mudar de instalações. A alteração de localização não foi grande, pois foi possível encontrar novo andar na mesma avenida e até no mesmo quarteirão, apenas alguns números acima (passámos do 37 para o 45). Talvez por isso o acontecimento não teve grande impacto. Os sócios estão habituados à pacatez das pequenas transições e isso dá-lhes uma agradável sensação de segurança. E com placidez se têm habituado a ver os anos a passar... e de repente já são quase 100!

Em 28 de Dezembro de 2011 a nossa Sociedade completará 100 anos, curiosamente no mesmo ano que todo o mundo celebrará o Ano Internacional da Química. Talvez seja uma boa altura para agitar as águas e para levar a mais importante e antiga sociedade científica portuguesa a muito mais pessoas do que aos seus cerca de 2200 sócios.

Mostrar ao cidadão comum o verdadeiro impacto da Química nas suas vidas e fazê-lo perceber que ela está presente em todas as actividades do dia-a-dia. Fazer entender que a ciên-

cia central é e continuará a ser muito mais parte da solução do que do problema. Trazer a Química para primeiro plano. Retomar o químico como profissional dotado de um conhecimento especializado, capaz de manter a sua perícia científica através de um desenvolvimento profissional contínuo. Talvez a ambição seja demasiada, mas 100 anos de vida merecem um sonho condigno.

Para terminar, não podemos senão, genuína e sentidamente, agradecer à direcção cessante o trabalho feito e acima de tudo terem chegado até aqui, assegurando esta preciosa continuidade. Assim consigamos nós dar conta da tarefa que nos foi agora confiada.

P'la Direcção

O Secretário-Geral
Joaquim Faria

COMPOSIÇÃO DOS ÓRGÃOS ELEITOS

Presidência:

Presidente: Mário Nuno Berberan (IST)

Vice-Presidente: Maria José Calhorda (FCUL)

Conselho Executivo:

Secretário-Geral: Joaquim Faria (FEUP)

Secretário-Geral Adjunto: Adrian Silva (FEUP)

Secretário-Geral Adjunto: Marcela Segundo (FFUP)

Tesoureiro: Maria Manuel Marques (FCT-UNL)

Mesa da Assembleia Geral:

Presidente: Baltazar Castro (FCUP)

1º Secretário: Ana Cristina Freire (FCUP)

2º Secretário: Ricardo Franco (FCT-UNL)

Conselho Fiscal:

Presidente: Artur Silva (DQ-UA)

1º Secretário: Ana Cavaleiro (DQ-UA)

2º Secretário: Diana Pinto (DQ-UA)

BALANÇO DO MANDATO 2007-2009

Este mandato decorreu sob o signo da transformação e da mudança. Pela primeira vez, a SPQ teve um Secretário-Geral com sede profissional fora de Lisboa, o que foi possível com um novo modelo de funcionamento da Sede (mais recursos humanos e utilização de plataformas informáticas) e uma boa equipa de apoio em Lisboa. Algumas mudanças foram opções, no sentido de criar ou aperfeiçoar as estruturas necessárias para suportar o desenvolvimento da SPQ – como a contratação de um funcionário para a Sede e a aposta no desenvolvimento dos serviços de apoio “em linha” –, outras foram impostas pelas circunstâncias, como a selecção de uma nova equipa de contabilidade e a mudança da localização da Sede para as instalações actuais. A designação de 2011 como Ano Internacional da Química (coincidindo com o 1º Centenário da SPQ) propiciou uma outra mudança significativa: a alteração do calendário de realização dos encontros da SPQ, com o Encontro Nacional a voltar aos ‘anos ímpares’ a partir de 2011. Foi também um mandato que tentou uma mudança da imagem da SPQ – no seu interior (com maior ligação aos sócios) mas sobretudo para o exterior, com a participação activa nas organizações internacionais, a presença na comunicação social e a aposta em parcerias com outras instituições nacionais. E que iniciou – embora sem conseguir concluir – o processo de obtenção do Estatuto de Utilidade Pública pela SPQ.

- Índice -

1. O que nos propusemos fazer
(Programa de acção)

2. Actividades regulares da SPQ prosseguidas

- 2.1 Edição do boletim *Química*
- 2.2 Organização dos Encontros Sectoriais e do Encontro Nacional
- 2.3 Organização de Encontros Internacionais de Química realizados em Portugal
- 2.4 Organização das Olimpíadas Nacionais de Química

2.5 Participação nas competições internacionais das Olimpíadas de Química

2.6 Colaboração com o Ministério da Educação

2.7 Participação em organizações internacionais (FECS, IUPAC)

2.8 Participação na associação editorial europeia ChemPubSoc

3. Continuação de iniciativas da anterior Direcção

3.1 Estabilização do novo modelo de gestão

3.2 Aperfeiçoamento do portal de gestão de encontros

3.3 Participação na nova revista europeia (ChemSusChem)

4. O que foi feito de novo

4.1 Mudança de instalações da Sede

4.2 Revisão dos Estatutos

4.3 Nova calendarização dos Encontros (Nacional e Sectoriais)

4.4 Contratação de novos contabilistas

4.5 Contratação de nova empresa para apoio aos portais da SPQ

4.6 Renovação do sítio www.spq.pt (imagem, área de sócio)

4.7 Criação do modelo da “Newsletter” para envio aos sócios

4.8 Criação informal do Conselho Consultivo (Presidentes de Divisões e Grupos)

4.9 Normas para apoio a encontros científicos na área da Química

4.10 Participação no processo de designação do Ano Internacional da Química

4.11 Participação na nova revista europeia (ChemCatChem)

4.12 Assinatura de um Protocolo de Colaboração com a RSEQ

4.13 Assinatura de um acordo com o Colégio de Químicos da Galiza

4.14 Assinatura de protocolos com outros parceiros nacionais

4.15 Criação do Grupo de Química Terapêutica, GQT

4.16 Filiação da SPQ na *European Federation of Medicinal Chemistry* – EFMC

4.17 Filiação da SPQ na *International Society of Mass Spectrometry* – ISMS

4.18 Criação do Grupo de Químicos Jovens - GQJ

4.19 Revisão e actualização dos regulamentos dos Prémios SPQ (VS e FS)

4.20 Criação do Prémio Alberto Romão Dias da Divisão de Química Inorgânica

4.21 Criação do Prémio *Portuguese Young Chemist Award* do Grupo Químicos Jovens

4.22 Organização da Final das Olimpíadas de Química Júnior (ensino básico)

4.23 Protocolo com o ME/DGIDC para as Olimpíadas de Química

4.24 Protocolo com o ME/DGIDC para participação nas EUSO

4.25 Publicação de pareceres sobre os Exames Nacionais do 12º/11º ano

4.26 Acções junto da Fundação para a Ciência e a Tecnologia - FCT

4.27 Levantamento da situação dos químicos em Portugal

4.28 Inquérito de satisfação aos sócios

4.29 Folheto “7 boas razões para ser sócio da SPQ”

4.30 Edição do DVD de divulgação “Lugar ao sal”

4.31 Presença na Comunicação Social

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

5.1 Obtenção do Estatuto de Utilidade Pública

5.2 Aumento da quota da SPQ na revista europeia “Chemistry”

5.3 Criação do novo portal para as “Olimpíadas de Química”

5.4 Criação do Grupo de Espectrometria de Massa

5.5 Acordo Luso-Brasileiro para a Nomenclatura dos Elementos

5.6 Definição do plano de actividades para 2011

6. O que acabou por não se fazer

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

6.2 Angariação de sócios colectivos

6.3 Angariação de publicidade

6.4 Criação de um programa de acção para a comunicação social

7. Balanço Final

1. O que nos propusemos fazer

Transcreve-se o *Programa de Acção 2007-2009*:

A Sociedade Portuguesa de Química é uma das mais dinâmicas e participadas sociedades científicas do país. O maior desafio desta Direcção – a primeira da História da SPQ com um Secretário-Geral não residente em Lisboa – é o de manter o excelente nível da sua actividade.

Conscientes da responsabilidade de não desperdiçar o capital já adquirido pela Sociedade, propomo-nos manter e, se possível, melhorar a actividade da SPQ nas seguintes áreas:

- 1) Organização regular dos encontros que fazem parte da cultura da SPQ – incluindo o Encontro Nacional e os encontros das Divisões e Grupos.
- 2) Publicações periódicas – Boletim “Química” e Revistas Europeias de Química com participação da SPQ.
- 3) Publicações não periódicas, com destaque para os livros destinados ao ensino universitário, vídeos e CDs.
- 4) Programa Atracção Química, nas suas diversas vertentes.
- 5) Ligação aos sócios não pertencentes às instituições de ensino superior, com particular

- atenção aos sócios docentes do ensino básico e secundário.
- 6) Olimpíadas de Química (nacionais e internacionais).
- 7) Presença na ‘internet’, através da página da SPQ e também das páginas das escolas e instituições de ensino superior.
- 8) Representação e participação activa nos organismos internacionais especializados – nomeadamente IUPAC e EuChemS.
- 9) Angariação de novos sócios, individuais e colectivos, através de campanhas específicas.
- 10) Actualização do plano de contingência para as instalações da Sede, eventualmente em conjunto com as Sociedades Científicas que partilham o espaço da Sede.
- 11) Optimização do funcionamento do secretariado, com garantia de recursos humanos e recursos materiais compatíveis com a dinâmica actual da Sociedade.

Propomo-nos ainda promover as seguintes actividades, com vista ao alargamento da área de influência da SPQ:

- 12) Dinamização das actividades das Delegações Regionais, através do envolvimento mais directo nas actividades da Direcção.
- 13) Participação activa nos eventos internacionais de promoção da Química: Semana Europeia da Química e Ano Internacional da Química, caso se concretizem.

- 14) Desenvolvimento de protocolos de colaboração com outras sociedades científicas e associações com interesses comuns, com o duplo objectivo de oferecer mais aos sócios e multiplicar a visibilidade da SPQ.
- 15) Realização de um inquérito aos sócios, para avaliar o seu grau de satisfação e colher sugestões para futuras acções.
- 16) Análise da situação da Química e dos químicos em Portugal, com estudo da distribuição por sectores de actividade, situação da indústria química e afins, e das perspectivas de emprego.
- 17) Criação de um programa de acção para a comunicação social, visando a protecção da imagem da Química e a melhor informação dos cidadãos.

2. Actividades regulares da SPQ prosseguidas

2.1 Edição do boletim Química

O boletim da SPQ (4 números por ano), dirigido pelo Prof. Jorge Morgado (IST-UTL), saiu sempre com a regularidade exigida, sendo de assinalar a qualidade dos conteúdos publicados.

2.2 Organização dos Encontros Sectoriais e do Encontro Nacional

Realizaram-se 18 Encontros da SPQ, incluindo 17 encontros sectoriais (Divisões e Grupos) e um Encontro Nacional:

Encontros em 2007

Designação	Data e Local	Presidente da Comissão Organizadora
<i>Divisão de Química Alimentar</i> 8º Encontro de Química dos Alimentos	4 a 7 de Março Beja	Silvina Palma
<i>Divisão de Química Analítica</i> Analítica07 / 6º Encontro Nacional	29 e 30 de Março IST, Lisboa	Margarida Correia dos Santos
<i>Divisão de Química-Física</i> 8º Encontro de Química Física	21 e 22 de Junho Luso	Rui Fausto
<i>Divisão de Química Orgânica</i> 7º Encontro de Química Orgânica - 7ENQO	16-18 Julho FC Gulbenkian, Lisboa	Ana M. Lobo
<i>Grupo de Glúcidos</i> 7º Encontro de Glúcidos - GLUPOR 7	12 a 15 de Setembro ITQB, Oeiras	M. Helena Gil Júlia Costa
<i>Divisão de Catálise e Materiais Porosos</i> 8º Encontro CMP	21 a 23 de Setembro Lamego	Mariette Pereira
<i>Divisão de Ensino e Divulgação da Química</i> 5º DEDQ	8-10 Novembro U Minho, Braga	Carlos Folhadela
<i>Divisão de Química Inorgânica</i> 7º Encontro de Química Inorgânica	30 de Nov - 1 de Dezembro Fátima	Cristina Freire
<i>Grupo de Cromatografia</i> 5º Encontro Nacional de Cromatografia	10-12 de Dezembro DQ, Aveiro	José Manuel Nogueira Silvia Rocha

Outros: Trainmic workshop, 15 e 16 de Novembro de 2007 (Maria Filomena Camões)

Encontros em 2008

Designação	Data e Local	Presidente da Comissão Organizadora
<i>Encontro Nacional da SPQ XXI EN</i>	11 a 13 de Junho FEUP, Porto	Joaquim Faria
<i>Grupo de Química Terapêutica</i>	13 a 15 de Novembro FFUP, Porto	Madalena Magalhães Pinto
<i>Grupo de Químicos Jovens 1 PYCHEM</i>	15 a 15 de Outubro IST, Lisboa	Carlos Baleizão

Outros: Trainmic workshop, 13 e 14 de Novembro de 2008 (Maria Filomena Camões)

Encontros em 2009

Designação	Data e Local	Presidente da Comissão Organizadora
<i>Divisão de Química Alimentar 9º Encontro de Química dos Alimentos</i>	29 de Abril a 2 de Maio Angra do Heroísmo, Açores	Célia Gomes
<i>Divisão de Química-Física 9º Encontro de Química Física</i>	15-16 de Junho Aveiro	João Coutinho
<i>Divisão de Química Orgânica 8º Encontro de Química Orgânica - 8ENQO</i>	1-3 de Julho Aveiro	Artur Silva
<i>Grupo de Glúcidos 7º Encontro de Glúcidos - GLUPOR 8</i>	6-10 de Setembro Braga	Ana Paula Esteves
<i>Divisão de Química Inorgânica 8º Encontro de Química Inorgânica</i>	16-17 de Outubro Curia	Tito Trindade
<i>Grupo de Cromatografia 6º Encontro Nacional de Cromatografia</i>	14-16 de Dezembro Funchal, Madeira	José Câmara

2.3 Organização de Encontros Internacionais de Química

A SPQ esteve associada à organização de 8 encontros internacionais realizados em Portugal e um encontro realizado em Espanha.

O congresso internacional **19 Chem** foi organizado no âmbito das actividades do recém-formado Grupo de

História da Química, numa parceria entre a SPQ e o Museu da Ciência da Universidade de Lisboa.

A SPQ foi também co-organizadora da III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases – III RICI, que decorreu em Granada, Espanha, de 13 a 15 de Julho de 2009.

2.4 Organização das Olimpíadas Nacionais de Química

Durante este período, as “Olimpíadas de Química” ganharam espaço como uma actividade de grande visibilidade da SPQ junto de professores e alunos das escolas básicas e secundárias. As estruturas organizativa e de financiamento foram aperfeiçoadas, como descrito abaixo (pontos 4.22-4.24). Tal

Encontros Internacionais de Química

Designação	Data e Local	Presidente da Comissão Organizadora
19 Chem - 19th Century Chemistry: Spaces and Collections	1-4 de Fevereiro de 2007 Museu da Ciência da UL	Ana Carneiro
XI European Symposium on Organic Reactivity	2 a 7 de Julho de 2007 Universidade do Algarve, Faro	Maria de Lurdes Cristiano
2º Encontro Iberico de Coloides e Interfaces	11 a 13 de Julho de 2007 FCTUC, Coimbra	Hugh Burrows
II Jornadas Ibéricas de Fotoquímica	25 a 27 de Julho de 2007 Universidade do Algarve, Faro	Gaspar Martinho
SMARTER workshop Structure Elucidation from Combined...	6 e 7 de Setembro de 2007 Universidade de Aveiro	João Rocha
Vanadium – V6	17 a 19 de Julho de 2008 Fundação Calouste Gulbenkian	João Pessoa
Photocatalytic Products and Technologies	11 a 13 de Maio de 2009 Guimarães	Carlos Tavares
HyCeltec - II Iberian Symposium on Hydrogen, Fuel Cells, ...	13 a 17 de Setembro de 2009 UTAD, Vila Real	Verónica Bermudez

como nos anos anteriores, as *Olimpíadas de Química+* (ensino secundário) 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). Na fase Regional - uma fase não exclusiva, criada em 2006 para estimular a participação dos estudantes de regiões periféricas – participaram o Instituto Politécnico de Bragança (edições de 2006, 2007, 2008 e 2009), a Universidade do Algarve (2006, 2007, 2008 e 2009), e a Universidade dos Açores (2008).

O modelo de organização das *Olimpíadas de Química Júnior* (ensino básico) implica um grande empenho das instituições universitárias envolvidas. Neste triénio, organizaram provas regularmente 10 universidades (UTAD, UM, UP, UA, UC, UBI, UL, IST-UTL, UNL, e UAIG), e pontualmente as universidades de Évora, Açores e Madeira.

O número de escolas participantes nas *Olimpíadas de Química+* foi de 94 em 2007, 106 em 2008 e 128 em 2009 (Figura 1). O número de escolas participantes nas *Olimpíadas de Química Júnior* subiu de 150 em 2007, para 211 em 2008 e 233 em 2009 (Figura 2).

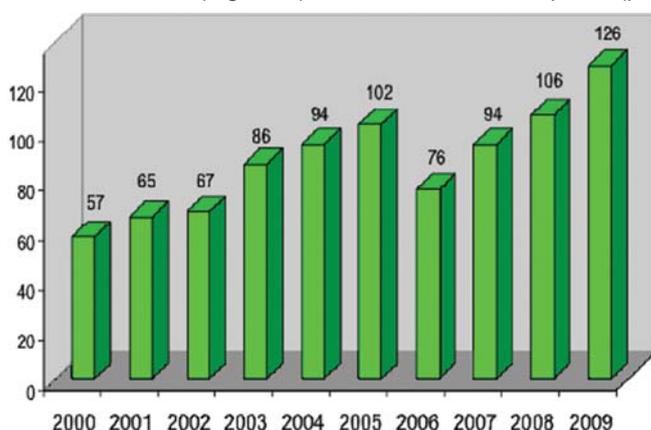


Figura 1 Número de escolas inscritas nas Olimpíadas de Química*

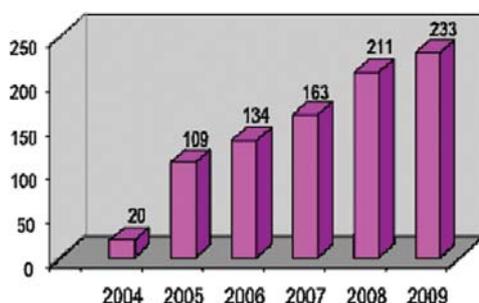


Figura 2 Número de escolas inscritas nas Olimpíadas de Química Júnior

2.5 Participação nas competições internacionais das Olimpíadas de Química



A SPQ manteve a representação de Portugal nas competições internacionais, nomeadamente as *International Chemistry Olympiads* (IChO) e as Olimpíadas Ibero-Americanas de Química (OIAQ). O esforço financeiro desta participação passou a ser assegurado pela contribuição do ME (ponto 4.23). A preparação dos alunos – indispensável para uma participação condigna – continuou a ser assegurada pelos colegas do Departamento de Química da Universidade de Aveiro.



Em 2009, Portugal participou pela primeira vez nas *European Science Olympiads* (EUSO). A SPQ assegurou a selecção e preparação dos alunos de Química nesta prova (ponto 4.24).

A preparação dos alunos na componente de Química é assegurada pelos colegas do Departamento de Química da FCT - Universidade Nova de Lisboa.

Os quadros seguintes resumem os resultados da participação portuguesa nas competições internacionais:

Olimpíadas Ibero-Americanas de Química

Ano, País organizador	Medalhas obtidas
2007, Brasil (Rio de Janeiro)	1 Prata, 1 Bronze
2008, Costa Rica (San Jose)	1 Prata
2009, Cuba (Havana)	1 Prata, 2 Bronze, 1 M. Honrosa

International Chemistry Olympiads (IChO)

Ano, País organizador	Medalhas obtidas
2007, Rússia (Moscovo)	(sem prémios)
2008, Hungria (Budapeste)	(sem prémios)
2009, Reino Unido (Cambridge)	(sem prémios)

European Science Olympiads (EUSO)

Ano, País organizador	Medalhas obtidas
2009, Espanha (Múrcia)	1 Bronze

2.6 Colaboração com o Ministério da Educação

A SPQ, na pessoa da Prof. Ana Rego (IST), manteve uma estreita colaboração com o GAVE – Gabinete de Avaliação Educacional, nomeadamente elaborando pareceres sobre os exames nacionais do 12º ano (Química).

Também com a colaboração da Prof. Ana Rego e do Secretário-Geral, a SPQ participou no processo de avaliação curricular realizado pelo GAAIRES - Grupo de Avaliação e Acompanhamento da Implementação da Reforma do Ensino Secundário.

A SPQ esteve também presente, na pessoa do seu Secretário-Geral, na

reunião convocada pelo ME para discussão do modelo de avaliação dos manuais escolares, tendo posteriormente emitido um parecer com a posição da SPQ sobre o Anteprojecto de Proposta de Lei relativa à Avaliação dos Manuais Escolares.

2.7 Participação em organizações internacionais (IUPAC e EuCheMS)

A SPQ manteve uma presença assinalável nas actividades da IUPAC e da EuCheMS.

Esta participação – que exige muitas vezes a presença física em reuniões e conferências – representa um peso financeiro incombustível para a SPQ e só é possível pelo esforço dos próprios representantes, que autofinanciam as suas deslocações.

Durante o período em apreço, representaram a SPQ nos organismos internacionais os seguintes sócios:

IUPAC



Prof. Bernardo Herold (IST) – Assembleia Geral da IUPAC*, Secretário do *Interdivisional Committee on Terminology, Nomenclature and Symbols*.

Prof. Maria Filomena Camões (FC-UL) – Vice-Presidente da *Analytical Chemistry Division*.

Prof. Maria Clara Magalhães (UA) – *Chair of Subcommittee on Solubility and Equilibrium Data*.

Prof. Amélia Pilar Rauter (FCUL) – Representante nacional na *Chemical Nomenclature and Structure Representation Division VIII* – Eleita em 2009 para o biénio 2010-11.

EuCheMS



European Association for Chemical and Molecular Sciences

Prof. José Empis (IST) – Tesoureiro da EuCheMS 2007-2009**.

Prof. Isabel Moura (UNL) – Representante nacional na *Division of Chemistry in Life Sciences*.

Prof. Maria Filomena Camões (FCUL) – Delegado nacional da *Division of Analytical Chemistry*.

Prof. Fernando Fernandes – Representante nacional na *Division of Computational Chemistry**.

Prof. Irene Silveira (FFUC) – Representante nacional na *Division of Food Chemistry*.

Prof. Maria José Calhorda (FCUL) – Representante nacional na *Division of Inorganic Chemistry*.

Dr. Isabel Santos (ITN) – Representante nacional na *Division of Nuclear and Radiochemistry*.

Prof. Artur Silva (UA) – Representante nacional na *Division of Organic Chemistry*.

Prof. Maria Helena Garcia (FCUL) – Representante nacional na *Division of Organometallic Chemistry*.

Prof. Ana Carneiro e Prof. Ana Simões (UNL) – Representantes nacionais na *Working Party of History of Chemistry*.

Prof. Maria Teresa Vasconcelos (FCUP) – Representante nacional na *Division of Chemistry and Environment*.

Dr. Pedro Góis – Representante nacional no encontro da *Young Chemistry Network**.

Dr. Alexandre Jesus – Representante nacional no encontro da *Young Chemistry Network**.

EFMC



European Federation
for Medicinal Chemistry

Prof. Luísa Sá Melo (UC) – Delegada nacional no Conselho Geral da EFMC*

Prof. Rui Moreira – Delegado nacional no Conselho Geral da EFMC*

2.8 Participação na associação editorial europeia ChemPubSoc



A SPQ manteve a presença regular nas actividades da associação responsável pela publicação das revistas científicas europeias (ChemPubSoc, anteriormente designada EuChemSoc), nomeadamente nas reuniões do conselho de administração, através do seu Vice-Presidente, Prof. Mário Nuno Berberan.

3. Conclusão de iniciativas começadas pela anterior Direcção

3.1 Estabilização do novo modelo de gestão

A anterior Direcção iniciou a adaptação do modelo de gestão da SPQ às exigências criadas pelo seu próprio crescimento – uma adaptação que teve a sua face mais visível no reforço dos recursos humanos da Sede e na implementação de procedimentos de gestão em-linha (“online”), baseados nas tecnologias da *internet*.

* - teve o apoio da SPQ em algumas despesas
** - suportado pela SPQ

Nesta Direcção, este modelo experimental foi estabilizado, através da elaboração do orçamento capaz de suportar o acréscimo de despesa com os recursos humanos, da contratação de um licenciado em química para a Sede, do desenvolvimento e aperfeiçoamento das ferramentas de gestão em-linha, e da progressiva centralização no secretariado dos processos administrativos e de contabilidade.

3.2 Aperfeiçoamento do portal de gestão de encontros

Na mesma linha de acção, o portal de gestão de encontros foi aperfeiçoado de forma a proporcionar aos organizadores dos encontros um apoio muito significativo ao nível das tarefas administrativas, libertando-os assim para as tarefas mais relevantes ao nível do conteúdo científico e de organização local.

Durante o ano de 2009, o portal foi aperfeiçoado com os contributos de vários organizadores de encontros da SPQ – que classificaram muito positivamente o resultado final.

Entre as actuais características do portal de encontros da SPQ, salienta-se a possibilidade de criação rápida da página *web* do encontro, com ficha de inscrição articulada com a base de dados dos sócios, a emissão de recibos e a submissão de resumos (com possibilidade de criação automática do livro de resumos).

3.3 Participação na nova revista europeia (*ChemSusChem*)



Durante este mandato concretizou-se a criação da revista europeia *ChemSusChem* no seio da ChemPubSoc Europe – revista interdisciplinar na interface da química e sustentabilidade com a engenharia química, a biotec-

nologia, a ciência dos materiais e a investigação em energia.

4. O que foi feito de novo

4.1 Mudança de instalações da Sede

A mudança da Sede – imposta pela cessação do contrato de arrendamento das anteriores instalações – exigiu uma atenção permanente desta Direcção durante um período alargado. O processo, iniciado em Janeiro de 2007 e só concluído em Junho de 2008, incluiu – entre outros passos – a negociação da indemnização com a construtora Teixeira Duarte (que adquiriu o edifício), a definição dos acordos com as sociedades com as quais a SPQ partilhou o arrendamento da Sede anterior e da actual (SPF, SPM e SPFil), as reuniões com entidades várias para negociação da cedência de espaço (uma das quais abortada já em fase adiantada do acordo), e a realização das obras necessárias na nova Sede.

Este longo processo exigiu a articulação próxima da Comissão Executiva com a Presidência, e foi conduzido localmente pelo Vice-Presidente (Prof. Mário Nuno Berberan Santos) e pelo Secretário-Geral Adjunto (Prof. João Paulo Leal).

4.2 Revisão dos Estatutos

Os Estatutos da SPQ foram revistos, em Assembleia Geral realizada a 11 de Fevereiro de 2009, de forma a:

- 1) Actualizar a morada da Sede (alteração do artigo 3º - Sede);
- 2) Permitir a participação da SPQ numa sociedade comercial, tornando possível uma futura aquisição ou arrendamento de uma Sede (ou outro bem) por uma associação de Sociedades Científicas (aditamento ao artigo 2º - Objecto).

4.3 Nova calendarização dos Encontros (Nacional e Sectoriais)

O Conselho Directivo da SPQ aprovou a alteração da data de realização do XXII Encontro Nacional (EN) da SPQ, inicialmente previsto para 2010, para Março de 2011 - criando assim um evento marcante a nível nacional para as comemorações do Ano Internacional da Química e do 1º Centenário da SPQ.

A realização do EN em 'ano ímpar' (2011, 2013, 2015, ...) obrigou à alteração correspondente dos encontros das Divisões e Grupos, de forma a mantê-los maioritariamente nos anos sem EN, ou seja, agora nos 'anos pares'. O período de transição foi objecto de um debate alargado – no Conselho Directivo e no Conselho Consultivo, abaixo mencionado (ponto 4.8) – e contempla a organização de 'simpósios de Divisões e Grupos' durante o Encontro Nacional comemorativo de 2011.

De referir que a alteração da data do EN de 'ano par' para 'ano ímpar' permite também a futura realização de encontros conjuntos da SPQ e da RSEQ, tal como previsto no acordo celebrado entre estas sociedades ibéricas (ponto 4.12 abaixo).

4.4 Contratação de novos contabilistas

Face às dificuldades manifestadas pela anterior contabilista em assegurar o serviço com a qualidade pretendida, a SPQ aceitou participar com a SPF e SPM na contratação de um contabilista para as três sociedades, situação que se afigurava vantajosa.

No entanto, ao fim de alguns meses, foi possível constatar que a solução adoptada não estava ao nível das exigências impostas pela actividade da SPQ, o que obrigou a Direcção a rescindir o contrato e a proceder à selecção de uma empresa de contabilidade com a capacidade necessária. A nova empresa assegura a contabilidade da SPQ deste Março de 2008.

4.5 Contratação de nova empresa para apoio aos portais da SPQ

A relação qualidade/preço do serviço da empresa inicialmente contratada para assegurar o desenvolvimento e manutenção dos portais da SPQ (nomeadamente, sítio da SPQ, gestor de encontros e página das Olimpíadas de Química) degradou-se ao longo do tempo, pelo que a Direcção entendeu não renovar os contratos existentes e procurar alternativas no mercado, assumindo os custos inerentes à criação de portais de raiz.

4.6 Renovação do sítio www.spq.pt (imagem, área de sócio)



O sítio da SPQ na *internet* é uma janela aberta para a divulgação da Sociedade e para a comunicação com os sócios, o que justifica o cuidado na sua manutenção.

É de referir que o número de visitas mensal tem crescido significativamente nos últimos anos, como se verifica pelo número médio de visitantes/dia: de cerca de 40 em Janeiro de 2001 e 250 em Outubro de 2003 para os 770 em Novembro de 2009.

Para além do empenho na actualização frequente dos conteúdos fixos e das notícias (nem sempre tão frequente como desejável), houve a preocupação de refrescar a imagem geral do sítio e de aumentar as funcionalidades na área de sócio.

A área de sócio permite actualmente a actualização dos dados do sócio, a impressão de recibos de pagamento de quotas e a pesquisa de assuntos em qualquer número do boletim (esta funcionalidade – há muito prevista – é exclusiva para os sócios).

4.7 Criação do modelo “Newsletter” para envio aos sócios

Foi criado um modelo de “newsletter” de edição regular (inicialmente prevista para 2-3 edições/mês com 3-6 notícias cada, de acordo com o fluxo de notícias) para contacto mais rápido e mais próximo com os sócios.

4.8 Criação informal do Conselho Consultivo (Presidentes de Divisões e Grupos)

Com o objectivo de promover uma maior aproximação entre os presidentes de Divisões e Grupos e a Direcção - reconhecendo o seu papel relevante nas actividades da Sociedade – foi criado o Conselho Consultivo da SPQ.

Este órgão informal é constituído por todos os presidentes de Divisões e Grupos e tem por tarefa “apoiar o Secretário-Geral na definição das orientações e actividades científicas da SPQ – nas quais se incluem os ‘Encontros’ – e em todos os aspectos de funcionamento da Sociedade que careçam de uma opinião alargada dos seus membros”. As reuniões do Conselho Consultivo são convocadas pelo Secretário-Geral, que define a ordem de trabalhos e preside à reunião.

O Conselho Consultivo reuniu pela primeira vez a 8 de Dezembro de 2007 e posteriormente a 13 de Junho de 2008, tendo tido um papel relevante na definição do novo modelo de Encontros da SPQ – com alteração das datas de realização do Encontro Nacional e nova calendarização dos encontros sectoriais (ponto 4.3) – e no planeamento da estrutura de apoio aos Encontros (ponto 3.2).

4.9 Normas para apoio a encontros científicos na área da química

Foram definidas as normas específicas para apoio da SPQ aos eventos científicos externos na área de interesse dos sócios, com definição das condições oferecidas e contrapartidas exigidas.

O nível de envolvimento da SPQ pode ser ligeiro (Apoio), médio (Patrocínio) ou Elevado (Co-organização). As contrapartidas para o Apoio e Patrocínio centram-se na menção expressa da participação e nos descontos para os sócios. O nível de co-organização, porque consome recursos da SPQ, implica um custo por inscrição, cujo valor é acordado entre a organização e a Direcção da SPQ.

4.10 Participação no processo de designação do Ano Internacional da Química



A SPQ teve uma participação activa no processo de designação de 2011 como Ano Internacional da Química pelas Nações Unidas, apoiando todas as iniciativas conduzidas pela IUPAC. Em particular, a SPQ solicitou expressamente ao Embaixador Fernando Andresen Guimarães (Presidente da Comissão Nacional da UNESCO) e ao Embaixador José Ramalho Ortigão (Delegado Permanente de Portugal junto da UNESCO) o apoio da proposta da IUPAC na Assembleia Geral da UNESCO de Outubro de 2007 (Paris). Posteriormente, a SPQ solicitou o apoio do Embaixador João Salgueiro, Representante Permanente de Portugal junto das Nações Unidas, para aprovação da proposta na reunião da Assembleia Geral das Nações Unidas de Outubro de 2008 (Nova Iorque).

4.11 Participação na nova revista europeia (ChemCatChem)



A SPQ participou na criação da revista europeia ChemCatChem no seio da ChemPubSoc Europe (anteriormente designada EuChemSoc) – cujo objectivo é tornar-se a revista de referência para a área de catálise.

4.12 Assinatura de um Protocolo de Colaboração com a RSEQ

Em 2008, os presidentes da SPQ e da Real Sociedad Espanhola de Química (Prof. José Figueiredo e Prof. Nazario Martín, respectivamente) assinaram um convénio de cooperação bilateral que, entre outros objectivos, visa potenciar a influência das duas sociedades no contexto europeu e permite aos respectivos sócios beneficiar das condições oferecidas por cada sociedade. Este convénio prevê também a criação de um prémio para cientistas dos dois países, que será objecto de um acordo específico.

4.13 Assinatura de um acordo com o Colégio de Químicos da Galiza

Através do Presidente da SPQ, Prof. José Luís Figueiredo, e da Delegação Regional do Norte, foi formalizado um acordo com o Colégio de Químicos da Galiza para reactivar os Encontros Luso-Galegos de Química (o primeiro dos quais terá lugar em 2010, na Universidade de Aveiro).

4.14 Assinatura de protocolos com outros parceiros nacionais

Foi dada atenção à criação de protocolos e laços de colaboração com outras entidades, como uma forma de alargar a área de influência e a visibilidade da SPQ, e de proporcionar mais benefícios aos sócios.

Foram estabelecidos protocolos com os seguintes parceiros nacionais: *Cienciapt.net* – portal/publicação electrónica diária que disponibiliza informação de referência na área da Ciência, Tecnologia e Inovação, de acesso pago. (âmbito: partilha de notícias; divulgação da SPQ; acesso gratuito através da área de sócio)

Ciência Hoje – portal de notícias de Ciência e Tecnologia (âmbito: carteira de conferências da SPQ no programa “Cientistas vão à Escola”).

Texas Instruments Portugal – empresa de equipamento electrónico (âm-

bito: apoio a olimpíadas de química; actividades para professores “química com calculadora”; descontos na aquisição de produtos TI).

Solvay-Hovione – empresas farmacêuticas (âmbito: parceria institucional no prémio “SHIC - Solvay & Hovione Ideas Challenge”).



Viver a Ciência – associação para divulgação da ciência (âmbito: descontos nas quotas de sócios comuns).

Belver Hotels e *AC Hotels* – cadeias hoteleiras (âmbito: descontos para sócios).

4.15 Criação do Grupo de Química Terapêutica, GQT

Em 2008, por proposta fundamentada de um grupo de sócios, foi criado o Grupo de Química Terapêutica, sendo a sua primeira presidente a Prof. Maria Luísa Sá e Melo (FF-UC).

4.16 Filiação da SPQ na European Federation of Medicinal Chemistry – EFMC

Na sequência da criação do Grupo de Química Terapêutica, a SPQ solicitou e obteve a filiação na *European Federation of Medicinal Chemistry* – EFMC.

4.17 Filiação da SPQ na International Society of Mass Spectrometry – ISMS

A pedido de alguns sócios, a SPQ filiou-se na *International Society of Mass Spectrometry* – ISMS, como um primeiro passo para a criação do Grupo de Espectrometria de Massa da SPQ.

4.18 Criação do Grupo de Químicos Jovens - GQJ



Em 2008, por proposta fundamentada

de um grupo de sócios, foi criado o Grupo de Químicos Jovens, sendo a primeira presidência constituída pelos Doutores Carlos Baleizão (IST), Frederico Ferreira (UNL) e Pedro Góis (IST).

Através deste grupo, a SPQ passou a integrar a rede *European Young Chemists Network* (EYCN) da EuChemS.

4.19 Revisão e actualização dos regulamentos dos Prémios SPQ (VS e FS)

Os regulamentos dos prémios SPQ “Ferreira da Silva” e “Vicente Seabra” foram revistos e actualizados, de forma a permitir uma gestão mais eficiente dos procedimentos de abertura do concurso, recolha de candidaturas e selecção do vencedor, sob coordenação do Presidente da SPQ.

(Regulamentos aprovados na reunião do Conselho Directivo de 11 de Junho de 2008)

4.20 Criação do Prémio Alberto Romão Dias

Por proposta fundamentada da Divisão de Química Inorgânica, foi criado no âmbito desta divisão o prémio “Alberto Romão Dias”, destinado a premiar um Químico que, pela obra científica produzida em Portugal, tenha contribuído significativamente para o avanço da Química Inorgânica e Organometálica, em qualquer das suas áreas.

4.21 Criação do Prémio Portuguese Young Chemist Award



Por proposta fundamentada do Grupo Químicos Jovens, foi criado no âmbito deste Grupo o prémio PYCA - *Portuguese Young Chemist Award*, que visa promover a excelência da Química desenvolvida por Jovens Investigadores, com especial enfoque no impacto desta Ciência na Sociedade.

Este prémio é atribuído “com base no trabalho desenvolvido durante o Doutoramento, mas colocado esse trabalho num contexto de divulgação científica e na capacidade do Jovem Investigador em demonstrar o impacto que o seu trabalho teve na sociedade”.

4.22 Organização da Final das Olimpíadas de Química Júnior (ensino básico)

Em 2008 foi finalmente introduzida a prova final das Olimpíadas de Química Júnior – com acesso a uma competição internacional – completandose assim o ciclo de competição desta faixa etária.

Para a realização das primeiras finais concorreram e foram seleccionadas as universidades do Porto (DQ-FC, 2008), de Lisboa (DQB-FC, 2009) e de Coimbra (DQ-FCT, 2010).

4.23 Protocolo com o ME/DGIDC para as Olimpíadas de Química

Em 2007 foi estabelecido um protocolo com a Direcção Geral de Inovação e de Desenvolvimento Curricular que visa garantir a realização das “Olimpíadas de Química” nas suas etapas regionais e nacionais, e assegurar a representação de Portugal nas competições internacionais.

A SPQ submete anualmente o programa de actividades e o respectivo orçamento global, sendo o montante de financiamento decidido pelo ME/DGIDC.

4.24 Protocolo com o ME/DGIDC para participação nas EUSO



No final de 2008 foi estabelecido um protocolo com a Direcção Geral de Inovação e de Desenvolvimento Curricular, a Sociedade Portuguesa de Física (SPF) e a Ordem dos Biólogos (OB), para organização conjunta da representação de Portugal na competição europeia de ciências “European Science Olympiads” (EUSO).

A SPQ selecciona 3 dos 6 representantes nacionais através das “Olimpíadas de Química Júnior” e assegura a preparação das equipas na componente de Química (a SPF apura os restantes 3 elementos e assegura a preparação em Física; a OB assegura a preparação em Biologia).

À DGIDC compete divulgar a iniciativa nas escolas, coordenar a fase internacional, e assegurar os encargos financeiros decorrentes da participação portuguesa na EUSO.

4.25 Publicação de pareceres sobre os Exames Nacionais do 12º/11º ano

Durante alguns anos, a SPQ assegurou a publicação da resolução dos exames nacionais do secundário e a sua divulgação no sítio da SPQ e pelos órgãos de comunicação social. Esta tarefa perdeu significado a partir do momento em que o próprio ME passou a divulgar a resolução oficial no próprio dia do exame.

A SPQ passou então a ser solicitada para emitir pareceres sobre os próprios exames, nomeadamente, sobre o seu grau de dificuldade, qualidade e rigor científico.

Esta é uma tarefa de muita visibilidade e exposição e que foi sujeita a grande pressão dos órgãos de comunicação social (e, indirectamente, do próprio ME), devido aos erros e incorrecções dos exames, particularmente notórios nos anos de 2007 e 2008 – e que exigiu à Direcção uma posição muito clara de independência, firmeza de convicções e clareza de objectivos.

A elaboração dos pareceres foi assegurada pela Prof. Ana Rego, em articulação próxima com a Direcção pelos motivos acima expostos.

4.26 Acções junto da Fundação para a Ciência e a Tecnologia – FCT

A Direcção da SPQ tentou fazer ouvir a voz dos químicos portugueses junto da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) a propósito de algumas questões que afectaram a actividade científica dos seus associados.

Foram apresentados ao presidente da FCT (por carta e através de audiências

expressamente solicitadas) as posições da SPQ relativas a (i) concurso de projectos científicos na área de Química, (ii) novas regras de aquisição de bens e serviços, e (iii) legislação sobre solventes em laboratórios de investigação.

4.27 Levantamento da situação dos químicos em Portugal

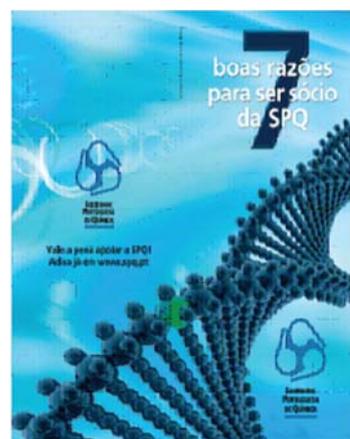
Foi realizado um estudo sobre o número de diplomados na área de Química formados em Portugal desde 1966 a 2007 e sua distribuição profissional geral (investigação, ensino, indústria). Um resumo deste trabalho foi publicado no “Química” nº 110.

4.28 Inquérito de satisfação aos sócios

Foi realizado um inquérito de satisfação aos sócios “em-linha”, utilizando as ferramentas disponibilizadas pelo “Google”.

A adesão dos sócios foi limitada (cerca de 100 respostas), fornecendo indicações globalmente positivas sobre o portal da SPQ, o Boletim e os serviços da Sede.

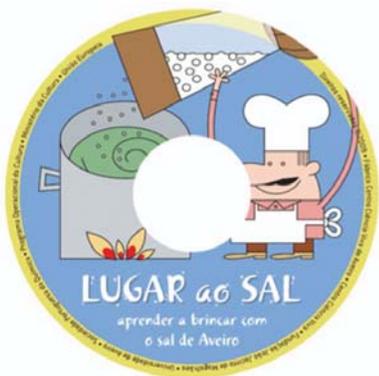
4.29 Folheto “7 boas razões para ser sócio da SPQ”



Foi desenvolvido um folheto de angariação de sócios - à semelhança dos apresentados por outras sociedades internacionais - com um trabalho de *design* profissional obtido a título gracioso.

4.30 Edição do DVD de divulgação “Lugar ao sal”

A SPQ participou na edição do DVD de divulgação científica “Lugar ao Sal”, tendo assegurado a participação nos direitos de autor da obra.



O DVD foi distribuído gratuitamente aos sócios com o “Química” nº 114.

4.31 Presença na Comunicação Social

A presença na Comunicação Social é importante para reforçar a imagem da SPQ como sociedade científica activa e, sobretudo, responsável e independente.

Durante este mandato foram publicadas notícias em jornais nacionais de elevada circulação (em alguns casos com ecos em rádio e televisão) com reflexos positivos na imagem da SPQ nos seguintes temas: Exames nacionais do ensino secundário; Medalhas obtidas por alunos portugueses nas Olimpíadas internacionais; Organização do XX Encontro Nacional no Porto; A escolha do curso superior / “Jovens escolhem cursos sem futuro”; Estudo “Químicos em Portugal”.

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

5.1 Obtenção do Estatuto de Utilidade Pública

Em Dezembro de 2007, a SPQ deu início ao pedido de reconhecimento do Estatuto de Associação/Entidade de Utilidade Pública, com a entrega do requerimento fundamentado à Câmara Municipal de Lisboa. Neste momento, depois de um processo moroso (que exigiu frequentes esclarecimentos e sublinhados da fundamentação apresentada), o pedido encontra-se no Gabinete do Primeiro-Ministro, aguardando aprovação final.

5.2 Aumento da quota da SPQ na revista europeia “Chemistry”

Em 2009, a SPQ deu início às nego-

ciações para a possível aquisição de 3% da revista “Chemistry”, como reforço da sua quota actual de 5%.

5.3 Criação do novo portal para as “Olimpíadas de Química”

A actual dimensão das “Olimpíadas de Química” justifica a criação de um portal específico de gestão de eventos, com capacidade de gestão de informação, gestão de inscrições e armazenamento histórico.

A tarefa foi adjudicada em Setembro de 2009, estando já funcional a componente de inscrições e em desenvolvimento a componente de ferramentas de bastidores (“back-office”).

5.4 Criação do Grupo de Espectrometria de Massa

Na sequência da filiação da SPQ na *International Society of Mass Spectrometry*, foi iniciado o processo de constituição do Grupo de Espectrometria de Massa.

5.5 Acordo Luso-Brasileiro para a Nomenclatura dos Elementos

A SPQ, através de um grupo de trabalho coordenado pelo Prof. B. Herold, está a ultimar com o CBAQ (Comité Brasileiro para Assuntos de Química junto à IUPAC) o acordo para a tradução da Tabela Periódica dos Elementos da IUPAC. Esta tradução deverá ser reconhecida pela IUPAC como versão oficial de Língua Portuguesa.

5.6 Definição do plano de actividades para 2011

No ano de 2011 coincidem as celebrações do Ano Internacional da Química e do 1º Centenário da SPQ, o que constitui uma excelente oportunidade e um grande desafio para a SPQ.

Durante este mandato foram tomadas algumas decisões relevantes – como a alteração da data e da estrutura do XXII Encontro Nacional (ponto 4.3) – e foram iniciados os contactos com entidades financiadoras e possíveis entidades parceiras para as actividades a realizar. No entanto, o plano de actividades está ainda numa fase muito incipiente.

6. O que acabou por não se fazer

6.1 Tradução de livros de divulgação

e produção de estojo de experiências de química

6.2 Angariação de sócios colectivos

6.3 Angariação de publicidade

6.4 Criação de um programa de acção para a comunicação social

7. Balanço final

Mais do que um relatório de actividades, este documento é uma demonstração da vitalidade da SPQ! A comunidade nacional de químicos, professores e estudantes de Química, está viva e activa, e 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 de várias das 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.

Paulo Ribeiro Claro
Secretário-Geral da Direcção
cessante da SPQ

INQUÉRITO SPQ

Pelo terceiro ano consecutivo, a SPQ realizou um inquérito sobre o funcionamento e a qualidade dos serviços prestados. O questionário esteve disponível *online* para votação de 11 de Novembro de 2009 a 4 de Janeiro de 2010.

A recolha de opiniões incidiu nos serviços prestados aos sócios, nos En-

contros e nos meios de divulgação utilizados durante 2009:

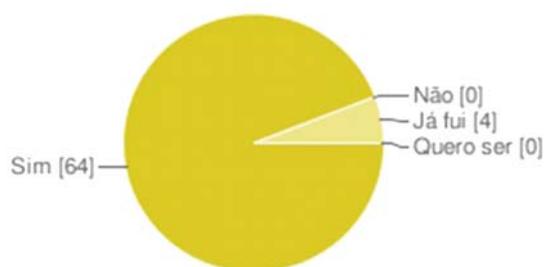
- Nos meios de divulgação questionamos a evolução do Boletim, a receptividade das *newsletters* mensais e o acesso ao portal *cienciapt*;
- Nos serviços aos sócios questionamos a eficiência do secretariado, a

utilização da área de sócio e dos recibos *online*.

Os resultados nos temas referidos, assim como nos de satisfação geral com a SPQ e nos seus Encontros, ajudarão a SPQ a melhorar e a otimizar os seus serviços.

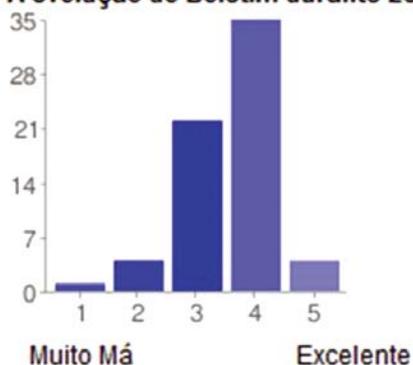
Obrigado pela vossa colaboração.

É sócio da SPQ?



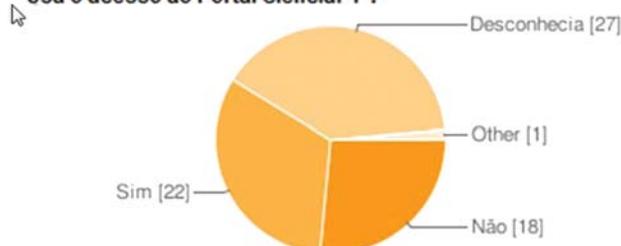
Sim	64	94%
Não	0	0%
Já fui	4	6%
Quero ser	0	0%

A evolução do Boletim durante 2009



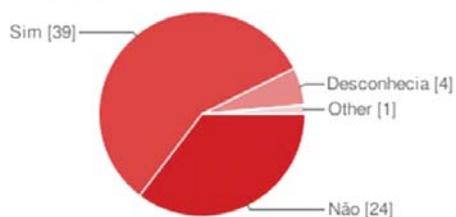
1 - Muito Má	1	2%
2	4	6%
3	22	33%
4	35	53%
5 - Excelente	4	6%

Usa o acesso ao Portal CienciaPT ?



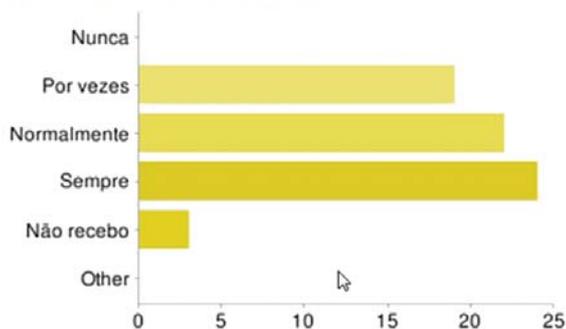
Não	18	26%
Sim	22	32%
Desconhecia	27	40%
Other	1	1%

Utiliza a área de Sócio?



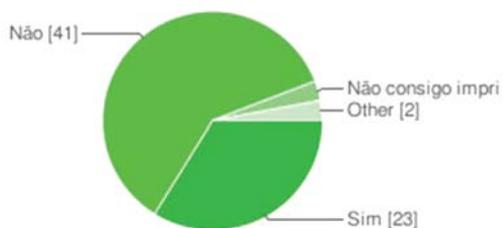
Não	24	35%
Sim	39	57%
Desconhecia	4	6%
Other	1	1%

Lê as newsletter mensais da SPQ?



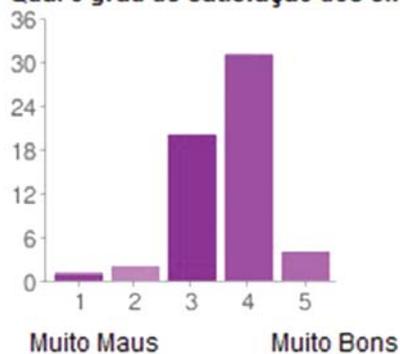
Nunca	0	0%
Por vezes	19	28%
Normalmente	22	32%
Sempre	24	35%
Não recebo	3	4%
Other	0	0%

Usa o acesso aos recibos online pela área de sócio?



Sim	23	34%
Não	41	60%
Não consigo imprimir	2	3%
Other	2	3%

Qual o grau de satisfação dos encontros organizados pela SPQ ?



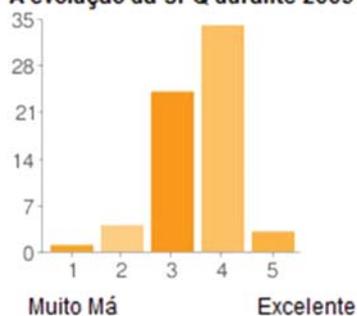
1 - Muito Maus	1	2%
2	2	3%
3	20	34%
4	31	53%
5 - Muito Bons	4	7%

Qual a eficiência do secretariado da SPQ ?



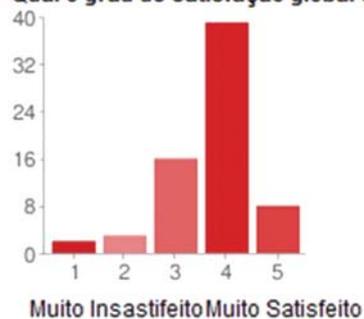
1 - Pouco Eficientes	1	2%
2	4	6%
3	19	31%
4	28	45%
5 - Muito Eficientes	10	16%

A evolução da SPQ durante 2009



1 - Muito Má	1	2%
2	4	6%
3	24	36%
4	34	52%
5 - Excelente	3	5%

Qual o grau de satisfação global com a SPQ?



1 - Muito Insatisfeito	2	3%
2	3	4%
3	16	24%
4	39	57%
5 - Muito Satisfeito	8	12%

Sugestão:

“Como professor de Química no ensino secundário gostava que a SPQ desse mais ênfase às olimpíadas de Química, seguindo o exemplo da sua congénere SPF. Actualmente não vou a encontros. Em relação ao boletim considero que devia trazer mais artigos sobre actualidade científica e menos sobre educação.”

SEMIFINAIS DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA⁺

Decorreram, no passado dia 13 de Março, as semifinais das Olimpíadas de Química⁺, repartidas por três centros: Universidade do Porto, Universidade de Aveiro e Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa. Segue-se um breve relato sobre a forma como estas provas se desenrolaram.

Em jeito de balanço, é de salientar o grande aumento do número de Escolas participantes nestas Olimpíadas (tendo-se inscrito 149 Escolas), deixando aqui, em nome da direcção da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), o enorme agradecimento aos Professores acompanhantes na mobilização dos seus alunos e, acima de tudo, aos protagonistas destes eventos, os alunos.

UNIVERSIDADE DO PORTO

No dia 13 Março realizou-se mais uma semifinal das Olimpíadas de Química Mais no Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Apresentaram-se a esta prova 43 das 48 escolas inscritas na plataforma *web* da SPQ. Foi um dia muito animado para alunos e professores. Do programa constavam, para além da realização da prova, várias actividades para os participantes. Esta edição da semifinal contou com o apoio da Porto Editora e do Grupo Leya que contribuíram com ofertas para os alunos participantes e da Casa das Ciências que promoveu uma actividade para os professores acompanhantes.



Sessão de entrega de prémios

Apurados os resultados, as três equipas melhores classificadas foram:

1º lugar

Escola Secundária de Penafiel – constituída por Ana Catarina Bernardes, João Gama e Juliana Rocha, coordenada pela professora Isabel do Sameiro Vieira dos Santos;



Equipa vencedora das Semifinais realizadas na Universidade do Porto

2º lugar

Externato Cedros – constituída por Bernardo Manuel Limpo Serra Santos Dias, Bernardo Torres Branco Frazão Sardinha e Filipe Teixeira Basto Soares, coordenada pelo professor Nuno Miguel Gaspar da Silva Francisco;



Equipa que ficou em 2º lugar nas Semifinais na Universidade do Porto

3º lugar

Colégio Didálvi – constituída por Carlos César da Fonte Senra, João Carlos Lagarteira Barbosa e Tiago Manuel Pereira Barbosa, coordenada pela professora Teresa Lopes.



Equipa que ficou em 3º lugar nas Semifinais na Universidade do Porto

Estas equipas foram assim apuradas para a grande final a disputar em Aveiro no dia 8 de Maio.

O coordenador local:
Jorge Gonçalves

UNIVERSIDADE DE AVEIRO

A semifinal das Olimpíadas⁺ 2010 na Universidade de Aveiro contou com a participação de 48 equipas de outras tantas escolas.

Durante a manhã, enquanto as equipas prestavam prova dos seus conhecimentos, os professores acompanhantes tiveram a oportunidade de assistir a um seminário “Segurança em laboratório químicos” indo ao encontro das necessidades dos professores. Após o almoço, nas cantinas da Universidade de Aveiro, e enquanto o Júri de correcção se encontrava reunido a corrigir as provas, houve uma apresentação “Química em Espectáculo!!!” do agrado de todos os presentes. O Dia terminou com a entrega de medalhas, certificados de participação e um lanche.

Equipas vencedoras:

1º lugar

Escola Secundária com 3º Ciclo do Ensino Básico Soares Basto, de Oliveira de Azeméis – constituída por Catarina da Cunha e Silva M. Costa, João António Silva Nunes e António

Alves Figueiredo, coordenada pela professora Paula Cristina de Sousa Pereira Ornelas.



Equipa vencedora das Semifinais realizadas na Universidade de Aveiro

2º lugar

Escola Secundária com 3.º Ciclo do Ensino Básico de Carregal do Sal – constituída por Bryan Completo Santos, Vasco Figueiredo Batista e Ana Rita Marques, coordenada pela professora Anabela Figueiras dos Santos Batista.



Equipa que ficou em 2º lugar nas Semifinais na Universidade de Aveiro

3º lugar

Escola Secundária Alves Martins, de Viseu – constituída por José Nuno Azevedo Gomes Teixeira, Paulo Sérgio Pereira Gonçalves e João Luís Martins Pinheiro Penela, coordenada pelo professor Adelino Pinto.

O coordenador local:
Diana Pinto

INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO - UTL

As semifinais que decorreram no Instituto Superior Técnico envolveram equipas de 43 escolas, de um total de 47 escolas inscritas.

O dia começou com a sessão de boas vindas, que decorreu em dois anfiteatros em paralelo atendendo ao elevado número de participantes. À prova seguiu-se o almoço oferecido pela Reitoria da Universidade Técnica de Lisboa, e servido na cantina sita no

campus do IST. Até cerca das 16 horas, e enquanto uma equipa de professores do IST procedia à correcção das provas, os participantes participaram em duas sessões de divulgação: Luz sobre as Moléculas e Bolas de Sabão e Azoto Líquido.

Para terminar o dia, a divulgação dos resultados e a entrega de prémios foi feita no Centro de Congressos do IST pelo Sr. Reitor da UTL, o Prof. Fernando Ramôa Ribeiro, na presença do Presidente da SPQ, o Prof. Mário Nuno Berberan Santos.

As equipas que conseguiram os primeiros lugares foram:

1º lugar

Externato João Aberto Faria de Arruda dos Vinhos – constituída por Bárbara Casteleiro, Gonçalo Veríssimo e João Gama, coordenada pelo professor Jorge Ramos.



A equipa vencedora das Semifinais do IST com o Prof. acompanhante

2º lugar

Escola Secundária Leal da Câmara de Rio de Mouro – constituída por David Naod Berhanu e Mariana Isabel Marques, coordenada pela professora Rosa Tracana.



A equipa que obteve o 2º lugar nas Semifinais do IST

3º lugar

Escola Secundária com 3º Ciclo D. Inês de Castro de Alcobaça – constituída por Bernardo Pascoal Figueiredo, Catarina Mendes Correia e João Miguel Pimenta Pereira, coorde-



Entrega das medalhas à equipa vencedora pelo Sr. Reitor da UTL, Prof. Fernando Ramôa Ribeiro, na presença do Presidente da SPQ, o Prof. Mário Nuno Berberan Santos

nada pelo professor Gaspar da Silva Fernandes Vaz.



A equipa que obteve o 3º lugar nas Semifinais do IST

O coordenador local:
Jorge Morgado
(Fotos Mafalda Lancinha)

FASE REGIONAL DE BRAGANÇA DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA⁺ 2010



Alunos participantes e professores acompanhantes, presentes na Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química⁺ 2010

Com o intuito de despertar o interesse pela Química e cativar os alunos para esta área científica, decorreu no dia 3 de Fevereiro, nas instalações da Escola Superior de Tecnologia e Gestão (ESTiG) do Instituto Politécnico de Bragança, a 5ª edição da Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química⁺. A iniciativa, organizada pela Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) em conjunto com o Departamento de Tecnologia Química e Biológica da ESTiG, contou com o apoio da Câmara Municipal de Bragança e do Crédito Agrícola.

A prova, destinada a alunos do 10º e 11º anos do Ensino Secundário, foi elaborada com base nos conteúdos leccionados até ao 10º ano e incluiu uma componente teórica e outra laboratorial.

Este ano participaram 5 escolas do Distrito de Bragança, nomeadamente a **Escola EB2,3/S D. Afonso III de Vinhais**, **Escola EB2,3/S de Macedo de Cavaleiros** e três escolas da cidade de Bragança: **Escola ES/3 Abade de Baçal**, **Escola Secundária Miguel Torga** e **Escola ES/3 Emídio Garcia**, perfazendo um total de 20 equipas, 59 alunos participantes e 9 professores acompanhantes.

Após a recepção dos participantes, as equipas foram distribuídas em 2 turnos, um dos quais iniciou a prova pela realização da componente teórica e o outro pela componente prática, trocando no final da realização de cada um dos tipos de prova.

Este ano, a prova prática laboratorial, realizada nos laboratórios de Processos Químicos e de Química Analítica, teve como objectivo a determinação do teor em ferro presente na água de um poço através de um método espectrofotométrico.

No final, todos os professores e alunos receberam um certificado de participação e lembranças diversas. Os alunos das 3 equipas mais bem classificadas receberam o prémio monetário "Crédito Agrícola" correspondente à abertura de uma conta na Caixa de Crédito Agrícola Mútuo no valor de 100€, 75€ e 50€, para cada um dos alunos das equipas classificadas em 1º, 2º e 3º lugares, respectivamente.

As equipas vencedoras foram as seguintes:

Equipa Classificada em 1º lugar

- Maria Inês Borges, João Pedro Bra-



Equipa vencedora da Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química⁺ 2010

gada e Ricardo Jorge Rodrigues (Escola ES/3 Emídio Garcia)

Equipa Classificada em 2º lugar

- José Francisco Amaro, Luís Paulo Rodrigues e João Pedro Rodrigues (Escola Secundária Miguel Torga)

Equipa Classificada em 3º lugar

- Ana Morais, Ana Fernandes e André Pires (Escola EB 2,3/S de Macedo de Cavaleiros)

Os 1º, 2º e 3º lugares da classificação por escolas foram conseguidos pela Escola ES/3 Emídio Garcia, Escola Secundária Miguel Torga e Escola EB 2,3/S de Macedo de Cavaleiros, respectivamente. Todas elas foram premiadas com o financiamento da sua participação na Semifinal Nacional das Olimpíadas de Química⁺, que decorreram no dia 13 de Março no Porto (deslocação patrocinada pela Câmara Municipal de Bragança e alojamento patrocinado pelo Crédito Agrícola). Na Semifinal foram apurados os participantes na Final Nacional que se realiza no dia 8 de Maio de 2010 em Aveiro. Esta, por sua vez, permitirá apurar os alunos que representarão Portugal nas competições internacionais, nomeadamente nas Olimpíadas Internacionais e nas Olimpíadas de Química Ibero-Americanas. A estes e a todos os outros alunos, desejamos o maior dos sucessos pelos caminhos da Química!

Joana Amaral



O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) foi criado no dia 8 de Dezembro de 2007. Nestes dois anos, o GQJ tentou encontrar o seu espaço na estrutura da SPQ, dinamizando e dando mais visibilidade aos jovens químicos.

2 Anos de Actividades

A primeira actividade organizada pelo GQJ foi o *1st Portuguese Young Chemists Meeting* (1PYCheM) que decorreu entre os dias 15 e 17 de Outubro de 2008 no Instituto Superior Técnico.

O encontro contou com mais de 130 participantes de vários pontos do país e também da Roménia, Espanha, Alemanha, Estados Unidos da América, Bélgica, Suécia e França. A maioria dos participantes era constituída por jovens investigadores a realizarem trabalhos de mestrado, doutoramento e pós-doutoramento. Estes números e os comentários positivos que tivemos atestam o êxito desta arrojada iniciativa que terá a sua segunda edição já no próximo mês de Abril com a organização do 2PYCheM a cargo dos colegas da Universidade de Aveiro.

O GQJ lançou recentemente, em colaboração com a Gradiva, a primeira edição do Prémio Químicos Jovens/*Portuguese Young Chemists Award*. Este prémio, que terá uma periodicidade bianual, visa promover a excelência da Química desenvolvida por Jovens Investigadores, com especial enfoque no impacto desta Ciência na Sociedade. O prémio destina-se a recém-doutorados com menos de 35

anos e é atribuído com base no trabalho desenvolvido durante o Doutoramento, mas colocado esse trabalho num contexto de divulgação científica e na capacidade do Jovem Investigador para comunicar a relevância do seu trabalho junto da sociedade. A primeira edição teve 15 candidaturas de jovens investigadores recém-doutorados, estando a divulgação do prémio marcada para o dia 22 de Abril em Aveiro durante o 2PYCheM.

A página de internet do GQJ (www.spq.py/gqj) é uma ferramenta que permite ao GQJ uma presença e contacto mais próximos da comunidade de químicos portugueses, com especial ênfase nos jovens. A página está dividida em várias secções:

PYCheM – informação sobre o *Portuguese Young Chemists Meeting*;

ChemRus – experiências de Química com ficha pedagógica/científica e respectivo vídeo;

JobChem – descrição de vários motores de busca e *sites* de oferta de emprego em Portugal e no estrangeiro;

CheMba – espaço de discussão para jovens químicos que queiram desenvolver projectos de empreendedorismo;

PYCA – toda a informação relativa ao Prémio Químicos Jovens / *Portuguese Young Chemists Award*;

EYCN – este espaço será reservado para apresentar e divulgar as actividades da *European Young Chemists Network* (EYCN).

Na sua dimensão internacional, o GQJ tem representado os jovens químicos da SPQ na *European Young Chemists Network* (EYCN) da *European Association for Chemical and Molecular Sciences* (EuCheMS). A EYCN organiza duas reuniões de delegados por ano, onde se discutem as actividades a organizar e o plano de acção para angariar patrocinadores empresariais. Na última reunião que decorreu em Fevereiro, o GQJ fez-se representar pelo nosso colega Sérgio Santos, e discutiram-se as várias iniciativas a organizar pela EYCN no *3rd EuCheMS Chemistry Congress* que irá decorrer em Nuremberga (Alemanha) de 29 de Agosto a 2 de Setembro de 2010.

Futuro

O dinamismo e a criatividade do GQJ dependem de uma constante renovação de pessoas, que tragam novas ideias e energia. De forma a assegurar o futuro da liderança do grupo, ao criar o GQJ decidimos que os organizadores do PYCheM assumem também a liderança do GQJ nos dois anos seguintes, tirando vantagem da experiência de trabalho em conjunto adquirida na organização do nosso encontro. Assim, a partir do 2 PYCheM e durante os próximos dois anos, a liderança do GQJ será assegurada por Mariana Sardo, Vânia Calisto e Sérgio Santos da Universidade de Aveiro. Boa Sorte e Bom Trabalho.

Adesão

E por fim, apelamos mais uma vez para a adesão dos jovens químicos (< 35 anos) ao GQJ. Para oficializares a tua adesão ao GQJ basta enviares um fax (+351 217952349) ou email (sede@spq.pt) indicando o teu nome, nº de sócio da SPQ e a intenção de pertenceres ao GQJ. Só com a ajuda de todos, o GQJ se tornará um espaço incontornável na divulgação e celebração da Química por jovens em Portugal.

Contamos com a tua participação activa no NOSSO grupo

Grupo de Químicos Jovens

Carlos Baleizão, Frederico Ferreira,
Pedro Gois



We Chem! Do You?

Realizou-se no passado mês de Fevereiro, em Untervaz (Graubünden, Suíça), o quinto encontro dos representantes nacionais do *European Young Chemists Network* (EYCN) no qual o Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) se fez representar.

O Encontro iniciou-se com a apresentação resumida das actividades desenvolvidas pelo EYCN desde o último encontro dos representantes nacionais em Essen, Alemanha. Desde então, o EYCN adquiriu uma maior visibilidade junto da EuCheMS (*European Association for Chemical and Molecular Sciences*), tendo neste momento um representante permanente nas suas reuniões. Adicionalmente, o EYCN procedeu a uma renovação do

seu sítio de internet (www.eycn.eu) a par da criação de um grupo no Facebook.

O Encontro contou com a presença, além dos representantes nacionais, de Alexandra Schwartz (*Evonik Industries*) e David Ward (*Ward Consulting*) no papel de consultores e moderadores da reunião.

Esteve também presente, como convidado, Michael Hurrey da *Younger Chemists Committee* (YCC) da *American Chemical Society* (ACS) que manifestou o interesse em estabelecer um programa alargado de intercâmbio entre o EYCN e o YCC.

No ano de 2010, o EYCN terá uma participação activa na organização do

3rd EuCheMS Chemistry Congress a decorrer em Nuremberga, Alemanha, de 28 de Agosto a 2 de Setembro, sendo o programa final e as actividades desenvolvidas no âmbito do EYCN divulgados oportunamente. Para o ano internacional da Química 2011, o EYCN encontra-se a organizar uma actividade comemorativa sob a forma de uma competição intitulada "*Everyone is a Chemist*". O formato não foi inteiramente definido, mas assim que se inicie a implementação da competição, será possível obter todas as informações no sítio de internet do EYCN.

O balanço final do encontro é largamente positivo. O EYCN estabeleceu-se já como o representante europeu dos químicos jovens, estando neste momento a organizar actividades de promoção que lhe permite obter uma maior influência e visibilidade junto de instituições académicas e industriais.

Sérgio Santos

NOTÍCIA DA DIVISÃO DE QUÍMICA ANALÍTICA

Por iniciativa de membros portugueses da Divisão de Química Analítica da IUPAC, Clara Magalhães (Presidente da Subcomissão de Solubilidades) e Filomena Camões (Vice-Presidente da Divisão), teve lugar, no Departamento de Química da Universidade de Aveiro, nos passados dias 8 e 9 de Fevereiro, a respectiva Reunião Anual, que contou com a participação de onze dos seus membros titulares e associados, <http://www.iupac.org/>. Dos vários pontos da agenda, ressalta o projecto de revisão do "Orange Book", que é o livro de referência de nomenclatura de Química Analítica, em que a Divisão estará envolvida activamente nos próximos anos. Além desta acção prioritária, foram também analisadas as possíveis contribuições da Divisão nas actividades do Ano Internacional da Química, que se avizinha, IYC 2011, <http://www.chemistry2011.org/>. Estando a IUPAC empenhada activamente em alargar a sua implantação e

sendo África o continente com menor número de países aderentes, Portugal, através da Sociedade Portuguesa de Química, sua organização representante nacional, poderá ter um papel importante ao incentivar os países de língua oficial portuguesa a aderirem à IUPAC. Neste sentido e tirando partido da oportunidade, foi convidado a participar como observador da reunião, um docente da Universidade de Cabo Verde, estudante de doutoramento na Universidade de Aveiro. A IUPAC tem também vindo a desenvolver várias acções no sentido de introduzir os químicos mais jovens nas suas actividades. A *American Chemical Society* tem sido uma das organizações que mais tem apoiado esta iniciativa. Espera-se igual sucesso na promoção da participação activa dos químicos, jovens e menos jovens, pela via de outras organizações nacionais aderentes, nomeadamente a portuguesa. Nesta perspectiva foi

convidada a participar na reunião uma estudante de pós-graduação na Universidade do Porto, com ligações à Universidade de Aveiro. Do grande envolvimento verificado são de augurar auspiciosos desenvolvimentos.



Filomena Camões e Grupo dos participantes na reunião anual da Divisão de Química Analítica da IUPAC que ocorreu na Universidade de Aveiro em Fevereiro de 2010

QUÍMICA ULTRA-FRIA

A primeira indicação de que as reacções químicas podem ocorrer a temperaturas nano-Kelvin levanta a promissora possibilidade do nascimento da nova disciplina de química ultra-fria quanticamente controlada (*Science* **327** (2010) 853).

Jeremy M. Hutson, um professor de Química na Universidade de Durham, Inglaterra, comenta que “a possibilidade de conduzir reacções químicas virtualmente em condições de zero absoluto abre caminho a um regime completamente novo para a química e as reacções químicas. É uma demonstração fabulosa do modo como a mecânica quântica se manifesta no seu nível mais detalhado”.

As experiências envolveram a utilização de técnicas laser de forma a criar um gás ultra-frio de moléculas KRb no seu estado fundamental. “Nestas circunstâncias, pode-se pensar que qualquer actividade química estaria desactivada”, afirma Deborah S. Jin, investigadora do JILA, um laboratório de Física de precisão, gerido em

conjunto pelo *National Institute of Standards & Technology* e a Universidade do Colorado, em Boulder. Jin acrescenta, “de facto, os processos químicos ainda ocorrem nestas condições, mas o seu entendimento exige uma perspectiva decididamente diferente do conceito de reactividade. Em alternativa à visão clássica baseada na colisão de partículas, com a consequente interacção entre electrões, é necessário recorrer à mecânica quântica, onde as moléculas são encaradas como ondas. Se (e como) as interacções entre ondas ocorrem, são determinantes para a reactividade química nestas circunstâncias. Consequentemente, as moléculas podem reagir mesmo que praticamente não se movimentem e se encontrem relativamente distantes entre si”.

Num exemplo particular, Jin e colegas prepararam, a 250×10^{-9} K, moléculas KRb com estados electrónicos, vibracionais, rotacionais e de spin nuclear idênticos. Nestas condições, as moléculas praticamente não se movem e não reagem porque o princípio de Pauli não permite a sua interacção. No entanto, quando os investigadores

alteram a orientação dos spins nucleares de algumas moléculas, de forma a que as ondas das moléculas se possam sobrepor, pares de moléculas KRb com spins nucleares diferentes reagem e produzem K_2 e Rb_2 , mesmo quando as moléculas reagentes se encontram afastadas por distâncias de 1 μm .

A capacidade de criação de gases ultra-frios é actualmente circunscrita essencialmente a metais alcalinos e alcalino-terrosos, que apresentam uma química limitada. Os investigadores estão a desenvolver métodos novos para arrefecer uma maior variedade de moléculas, que poderão abrir ainda mais as possibilidades de definição de uma química controlada com precisão e de compreensão do papel da mecânica quântica na reactividade.

(Adaptado de *Chemical & Engineering News* - <http://pubs.acs.org/cen/news/88/i07/8807notw3.html>,
acedido em 15/02/2010)

Paulo Brito

O ELEMENTO 112 CHAMA-SE COPERNICIUM

A IUPAC aprovou oficialmente o nome copernicium, com o símbolo Cn, para o elemento de número atómico 112. A prioridade para a descoberta deste elemento, de acordo com os critérios estabelecidos, foi atribuída ao *Gesellschaft fur Schwerionenforschung* (GSI – Centro para a Pesquisa de Iões Pesados) em Darmstadt, Alemanha. A equipa do GSI propôs o nome copernicium que foi agora aprovado pela IUPAC. Sigurd Hofmann, líder da equipa GSI afirmou que a intenção foi a de “homenagear um cientista importante que não recebeu qualquer reconhecimento em vida e salientar a ligação entre a astronomia e o campo da química nuclear”.

O nome proposto pelo GSI respeita a longa tradição de nomear elementos

em honra de cientistas famosos. Nicolau Copérnico nasceu a 19 de Fevereiro de 1473, em Torún, na Polónia e morreu a 24 de Maio de 1543, em Frombork, também na Polónia. O seu trabalho teve excepcional influência no pensamento filosófico e político da Humanidade e no advento da ciência moderna baseada em evidências experimentais. Durante o seu período como cônego na Catedral de Frombork, Copérnico dedicou muitos anos ao desenvolvimento de um modelo conclusivo para observações astronómicas complexas do movimento do Sol, Lua, planetas e estrelas. O seu trabalho publicado com o título “*De revolutionibus orbium coelestium, liber sextus*” em 1543, implicou repercussões duradouras. Na verdade, o modelo Copernicano exigiu mudanças profundas na visão mundial relativa à astronomia e às forças físicas, para além de ter conduzido a consequên-

cias políticas e teológicas importantes. O sistema planetário proposto por Copérnico foi aplicado a outros sistemas análogos nos quais corpos se movem sob a influência de uma força direccionada para um centro comum. Curiosamente, à escala microscópica, este modelo corresponde ao modelo de Bohr para um átomo com o núcleo e os electrões orbitando em torno deste.

As Recomendações foram publicadas no número de Março da revista IUPAC, *Pure and Applied Chemistry* e está disponível online em *Pure Appl. Chem.* **82** (2010) 753.

(Adaptado de IUPAC - *International Union of Pure and Applied Chemistry* - http://www.iupac.org/web/nt/2010-02-20_112_Copernicium,
acedido em 20/02/2010)

Paulo Brito

CRISTALIZAÇÃO: UMA APLICAÇÃO EM DECORAÇÃO

ANA TAVARES SOUSA*

INTRODUÇÃO

A disciplina de Área de Projecto, do actual currículo do 12º ano de escolaridade, visa a aplicação dos saberes e dos saberes fazer, adquiridos pelos alunos ao longo do Ensino Secundário. Neste âmbito, com um grupo de alunas do curso de Ciências e Tecnologias, da Escola Secundária Stuart Carvalhais, foi desenvolvido o projecto Ciência na Decoração.

Este projecto tinha como objectivo a elaboração de velas de gel, decoradas com cristais de sais simples e duplos, sintetizados ou apenas cristalizados em laboratório.

O uso da cristalização de sais simples e duplos para fins decorativos começou por ser abordado e trabalhado, entre outros, pela professora Clementina Teixeira [1-4]. Por outro lado a síntese de sais duplos faz parte do actual programa do 11º ano de Física e Química A, como aprendizagem de técnicas laboratoriais, quer na sua componente prática, quer na componente teórica de planificação e preparação do trabalho experimental.

DESENVOLVIMENTO DO PROJECTO

Dado que o grupo de alunas em questão pretendia realizar um trabalho na área da decoração, fazendo velas decorativas, foi-lhes sugerido que tentassem a introdução de cristais de sais duplos e simples em velas de gel.

Como as alunas queriam representar os quatro elementos em que os filósofos gregos dividiam a matéria (água, fogo, terra e ar), foi elaborada uma lista das substâncias viáveis de sintetizar e cristalizar no laboratório da Escola e que apresentavam cores e formatos alusivos a esses elementos.

Assim, e condicionados pelos reagentes disponíveis, decidiu-se quais os cristais a sintetizar e a cristalizar. A principal preocupação técnica na escolha dos cristais foi a de que o ponto de fusão destes não fosse superior ao ponto de fusão do gel, uma vez que eles tinham de ser colocados no interior do gel antes do mesmo solidificar.

A tabela 1 resume as sínteses e cristalizações feitas. Os procedimentos apresentados destinam-se à produção de cristais de dimensões adequadas a recipientes com capacidade entre os 100 e os 200 mL.

cumpridas todas as normas de segurança, quer respeitantes ao trabalho laboratorial, quer às sínteses efectuadas, de acordo com os reagentes utilizados. Dado que alguns dos reagentes são bastante tóxicos, como o níquel e o crómio, foi colocado nas velas uma etiqueta, alertando para que estas eram meramente decorativas e não deveriam ser postas a arder.

As velas eram ainda acompanhadas de uma brochura onde se explicava um pouco da química dos cristais (a classificação em schönites e alúmens, as formas de cristalização,

Tabela 1 Resumo dos cristais sintetizados

Sais sintetizados ou cristalizados	Reagentes utilizados	Elemento grego representado
Sulfato de cobre (II) pentahidratado $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ – 22,5 g 50 mL H_2O	Água
Sulfato de níquel e potássio hexahidratado $\text{K}_2\text{Ni}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (schönite)	K_2SO_4 – 10,0 g $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ – 15,0 g 200 mL H_2O	Terra
Sulfato de crómio e potássio dodecahidratado $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ (alúmen)	K_2SO_4 – 5,7 g $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ – 18,7 g 50 mL H_2O	Fogo
Hexacianoferrato (II) de potássio trihidratado $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	$\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ – 50,0 g 100 mL H_2O	Fogo
Sulfato de amónio e magnésio hexahidratado $(\text{NH}_4)_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (schönite)	$\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ – 13,5 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ – 10,0 g 150 mL H_2O	Ar
Sulfato de cobre e cálcio Composição desconhecida	Mistura existente no laboratório – 22,5 g 50 mL H_2O	Água

Parte dos recipientes usados foram copos e boiões de iogurte. Aproveitaram também alguns copos de vidro de velas já ardidadas. Deste modo reciclaram recipientes de vidro.

Os suportes de cristalização utilizados foram pedras, conchas, arame e fio de algodão. A técnica utilizada nas sínteses foi a descrita por Clementina Teixeira em *On the Rocks* [2]. Foram

etc.) e se descreviam as regras de segurança a aplicar.

À medida que as alunas se familiarizaram com a técnica de síntese dos cristais e de preparação do gel, foram experimentando vários processos de colocação dos cristais no gel, produzindo efeitos diversos.

As figuras 1 a 4 ilustram algumas das velas produzidas.

* Escola Secundária Stuart Carvalhais



Figura 1 Água



Figura 4 Ar



Figura 2 Fogo



Figura 3 Terra



CONCLUSÃO

Este projecto permitiu às alunas desenvolver a prática de trabalho em laboratório, em todas as suas vertentes: planificação, manuseamento de material, aplicação correcta das regras de segurança, resolução de problemas pontuais e imprevistos, tomadas rápidas de decisão, autonomia. Este foi talvez o aspecto mais significativo da concretização deste projecto, uma vez que o actual currículo do Ensino Secundário não permite o desenvolvimento consciente da prática laboratorial. Durante os 10º e 11º anos os alunos passam pelos laboratórios e executam mecanicamente os protocolos que lhes são fornecidos, dependendo quase totalmente do auxílio do professor, não chegando no final a dominar nenhuma técnica. Embora não sejam estes os objectivos preconizados pelos programas, a aplicação dos mesmos em sala de aula acaba por conduzir a tal. A quantidade de temas abordados, quer teóricos, quer práticos, é demasiada para o tempo previsto para a sua leccionação, conduzindo a um amontoado de conceitos sem relação entre si, uma vez que os alunos não têm tempo para consolidar os conhecimentos que lhes são transmitidos.

Este projecto permitiu assim colmatar algumas das falhas existentes na aprendizagem dos alunos de Ciências e Tecnologias, que se vêm a notar desde a extinção das disciplinas de Técnicas Laboratoriais.

Como as próprias alunas referiram no seu relatório final, no início do projecto sentiram que não dominavam conhecimentos básicos de Química, que supostamente estariam consolidados.

A motivação para avançar levou-as a estudar novamente as matérias, tendo ultrapassado as suas dificuldades. No final sentiam-se já à vontade no laboratório de Química, sendo capazes de interpretar resultados obtidos e solucionar problemas, recorrendo aos conhecimentos teóricos necessários.

As velas feitas tiveram bastante sucesso na comunidade escolar, em particular pelos efeitos que os cristais produzem dentro do gel.

O projecto foi um início simples, dada a falta de experiência das alunas, a partir daqui muitas alternativas podem ser seguidas, tal como as próprias alunas abordaram no seu relatório final. Uma das ideias que surgiu durante a feitura das velas foi a sua construção em patamares. Por um acaso experimental as alunas deixaram secar demasiado uma porção de gel já introduzido no recipiente antes de colocarem cristais. Colocaram por cima mais gel e cristais e verificaram que o efeito era bastante interessante. Terminado

o projecto existiam já inúmeras ideias inovadoras.

Pretende-se aqui comunicar uma aplicação prática dos conhecimentos adquiridos na disciplina de Física e Química A. Este artigo não deve ser encarado como um protocolo para elaboração de velas a distribuir no mercado.

A concretização deste projecto na perspectiva de feitura de velas para arderem é viável. Mas para tal os critérios de escolha dos cristais a utilizar terão de ser diferentes. A partir desta ideia inicial poderão ser concebidos muitos outros projectos, tantos quantos a imaginação nos permitir.

As alunas do 12º D (2008/2009)
Escola Secundária Stuart
Carvalhais:

Ana Figueiredo, Ana Soraia
Guanilho, Joana Correia,
Mafalda Ferreira, Sadeline Faria

REFERÊNCIAS

- [1] C. Teixeira, A. Santana, C. Mesquita, *Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* **53** (1994) 50.
- [2] C. Teixeira, *O Livro das Pedras: Manual dos Sistemas Modulares para Cristalização "On the Rocks"*, ed. do autor (Novembro de 1995).
- [3] C. Teixeira, *Manual de Experiências das Acções de Formação da FOCO – "As Rochas Ornamentais no Ensino da Química"*, Instituto Superior Técnico (1996).
- [4] C. Teixeira, A. Tavares Sousa, I. Trigueiros, "Cristalização: Síntese de Sais Duplos", *Boletim da Sociedade Portuguesa de Química* **66** (1997) 25.

ACTUALIDADE CIENTÍFICA

SEQUESTRAÇÃO DE CARBONO: DIFICULDADES EM A IMPLEMENTAR

Foi referido no número anterior do *Química*, a respeito do aquecimento global e da sua relação com o aumento da concentração de CO₂ na atmosfera, que uma das soluções propostas para combater este efeito passa pela captura e sequestração de CO₂ em depósitos subterrâneos.

Apesar de esta medida ser apresentada como uma solução de curto/médio prazo, ela parece não estar a vingar, apesar de a indústria do petróleo estar já desde há quarenta anos a injectar CO₂ no subsolo para facilitar a extracção do petróleo.

Segundo a Agência Internacional de Energia, a forma mais barata de reduzir a metade as emissões de dióxido de carbono em 2050 seria usar a captura e sequestração de carbono para contribuir com 20% dos cortes neces-

sários. Em 2008, o G8 declarou que 20 grandes instalações deveriam ser iniciadas até finais de 2010. Contudo, verifica-se um atraso significativo: há apenas sete grandes projectos e a maioria destes usam o gás para libertar o petróleo aprisionado, um processo que não foi projectado para armazenar o dióxido de carbono. Há muita investigação e discussão sobre este tema mas o progresso real é muito fraco. Para os investidores, este parece ser ainda um negócio pouco atractivo porque é muito dispendioso (em particular a captura do CO₂) e a sua implementação em larga escala acabará por tornar a energia mais cara. Contudo, este não é o único obstáculo à sua implementação.

A revista *Nature* divulga, no seu número do passado dia 10 de Fevereiro, que a ideia de armazenamento do CO₂ no subsolo parece não convencer as populações. Traz um exemplo de uma proposta da Shell de injectar

400.000 toneladas de CO₂ sob um centro comercial antigo em Barendrecht, na Holanda, e que, embora contando com o apoio explícito do governo holandês, encontrou forte oposição dos residentes. Estes, não estando convencidos de que o processo é seguro e ambientalmente benéfico, opõem-se à sua implementação numa zona residencial. O conflito de interesses acentuou-se, tendo o presidente da câmara de Barendrecht ameaçado processar a Shell, em resposta a uma decisão do parlamento holandês de prosseguir com o projecto.

Apesar de o aquecimento global (e das suas previstas consequências) ser hoje um tema muito divulgado e conhecido da opinião pública, esta parece não estar ainda preparada para a implementação de algumas das medidas propostas para o combater.

JM

GRAFENO: DESENVOLVIMENTOS RECENTES

Descoberto em 2004, o grafeno – folhas de grafite com apenas um átomo de espessura – tem sido descrito como um condutor eléctrico muito bom, um semiconductor, usado no fabrico de transístores, e um material muito forte. De facto, segundo um estudo publicado na revista *Science* em 2008 (321, pp385-388), por um grupo da Universidade Americana de Columbia, o grafeno é mesmo o material mais resistente de sempre. Mas

são as suas propriedades eléctricas e ópticas as que recentemente mais atenção têm atraído.

Foram recentemente apresentados na *Nature Nanotechnology* (DOI: 10.1038/nnano.2009.474) avanços importantes para a aplicação do grafeno na electrónica. Uma equipa, formada por investigadores ingleses, suecos e italianos conseguiu obter grafeno com dimensões suficientes para ser usado em electrónica e foi capaz de medir as suas propriedades eléctricas com precisão sem precedentes.

Até então, era possível obter grafeno em pequenas folhas com fracções de milímetro. A exfoliação e a sua remoção com fita-cola a partir de grafite eram duas técnicas comuns. Neste estudo, a equipa foi capaz de produzir grafeno sobre carboneto de silício de forma prática e facilmente escalável.

JM

UM NOVO CATALISADOR PARA A OXIDAÇÃO DA ÁGUA

A energia solar apresenta-se hoje como uma das mais importantes fontes de energia renovável, embora seja ainda limitada a nossa capacidade de a usar.

O desenvolvimento de células fotovoltaicas tem sido objecto de um crescente interesse, com desenvolvimentos tecnológicos que envolvem vários materiais e arquitecturas de dispositivos. Contudo, estas funcionam apenas enquanto houver luz solar, pelo que é necessário investir em sistemas de armazenamento da energia eléctrica gerada.

A outra alternativa para a utilização da energia solar é a produção de combustível solar, passível de ser armazenado e usado quando não houver luz solar.

Para efectuar esta captura da energia solar sob a forma química é necessário desenvolver tecnologias adequadas. Em particular, procura-se optimizar a fotossíntese artificial, que combina uma espécie fotoactiva ou sensibilizador, que promove a separação de carga a partir de um estado

excitado. O electrão libertado é usado na redução de protões ou do dióxido de carbono.

O buraco produzido é compensado com a captura de um electrão proveniente da oxidação da água. Uma das limitações actuais ao desenvolvimento de combustíveis solares é a reacção de oxidação da água, ou mais concretamente o desenvolvimento de um catalisador desta reacção. A água é a única fonte de electrões capazes de reduzir os protões a H₂ ou reduzir CO₂ a combustíveis carbonáceos a uma escala global.

O desenvolvimento de um catalisador capaz de promover a oxidação da água, $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$, e que possa ser usado em grande escala, é uma tarefa difícil de concretizar. Esse catalisador tem que permanecer activo durante longos períodos de tempo ou ser facilmente regenerado e ser preparado a partir de materiais baratos e disponíveis. Os catalisadores actualmente disponíveis tendem a perder rapidamente a sua actividade catalítica e não são sujeitáveis a processos de auto-regeneração.

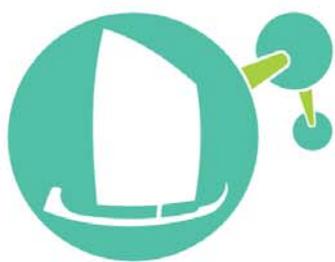
Uma equipa de investigadores americanos e franceses reportou um catalisador para a oxidação da água,

solúvel em água, que possui quatro átomos de cobalto no seu centro reactivo (*Science* 328(2010) 342-345). Este encontra-se rodeado de ligandos que são aniões polioxotungstato.

Este catalisador parece combinar as propriedades de catalisadores já conhecidos e eliminar algumas das suas limitações, prometendo contribuir para um significativo avanço desta área.

(Adaptado de J. K. Hurst em *Perspectives, Science* 328 (2010) 315)

JM



2PYChem

2nd Portuguese Young Chemists Meeting

Universidade de Aveiro

21 - 23 April 2010

www.spq.pt/gqj/2pychem

2pychem@spq.pt

Kurt Wüthrich

(Nobel Prize in Chemistry 2002)

The Scripps Research Institute (TSRI)

ETH Zürich

Carlos Pascoal Neto

Universidade de Aveiro

José J. G. Moura

Universidade Nova de Lisboa

Manuela Ribeiro Carrott

Universidade de Évora



UMA NOVA ESTRATÉGIA PARA A SÍNTESE CONTROLADA DE POLIPROPILENO

Uma nova estratégia para a produção de materiais poliméricos baseados em propileno e α -olefinas mais longas, promete estimular a eficiência da síntese polimérica e possibilitar um grande controlo sobre os tamanhos de cadeia e outras propriedades dos materiais poliméricos. O processo, desenvolvido por Lawrence R. Sita e colaboradores da Universidade de Maryland, faculta o acesso por parte dos químicos a óleos anteriormente inacessíveis e a ceras que poderão ser úteis na produção de químicos de especialidade, como detergentes, lubrificantes e plastificantes.

O investigador de polímeros Craig J. Hawker da Universidade da Califórnia, em Santa Barbara, afirma, “enquanto milhões de toneladas de α -olefinas lineares são produzidas todos os anos a partir do etileno, os derivados correspondentes e potencialmente mais interessantes de propileno (ou de α -olefinas mais pesadas), não podem ainda ser produzidos de uma maneira robusta e eficiente. Este trabalho procura ultrapassar problemas anteriores e proporciona um processo de baixa temperatura, altamente controlado, com potencial extraordinário para desenvolvimento em laboratórios académicos e industriais”.

O grupo de Sita baseou-se em duas técnicas de polimerização já existentes para o aperfeiçoamento de uma nova estratégia. A primeira técnica consiste na polimerização viva de Ziegler-Natta de α -olefinas, que envolve normalmente o crescimento contínuo de uma cadeia polimérica única em cada molécula de um catalisador de metal de transição. A segunda técnica, polimerização de transferência de cadeia, baseia-se na transferência de uma cadeia de polímero para um alquil de metal de grupo principal inactivo, como o dietil-zinco, de forma a terminar o crescimento de uma cadeia e, conseqüentemente, iniciar o crescimento de outra. Recentemente, cientistas de polímeros descobriram um modo de tornar este processo reversível, abrindo novos caminhos para a produção de polímeros e copolímeros.

Através da formulação de um conceito de transferência de cadeia reversível, Sita, Jia Wei, e Wei Zhang utilizam reagentes de alumínio e zinco, juntamente com um catalisador de háfnio, para a produção de polipropileno, como uma solução para tornear o problema da restrição “uma-cadeia-por-metal” da polimerização viva (*Angew. Chem. Int. Ed.*, doi: 10.1002/anie.200906658). Sita afirma que “os três metais têm de actuar em conjunto para que a química funcione”.

Durante a polimerização, unidades monoméricas de propileno inserem-se entre o háfnio e as cadeias existentes de polipropileno. A cadeia em crescimento troca rapidamente com uma cadeia oligomérica residente no substituinte de alumínio através do composto de zinco.

As taxas de transferência de Hf–Zn/Zn–Al são muito maiores do que as da transferência directa Hf–Al e todas as taxas de troca de cadeia são superiores às do passo de inserção de propileno. Estas propriedades possibilitam que múltiplas cadeias de propileno cresçam ao mesmo ritmo, conduzindo a um controlo eficiente de baixos pesos moleculares e distribuições de pesos apertadas.

A natureza deste processo permite a preparação de copolímeros em bloco e a funcionalização do grupo terminal dos oligómeros, assim como a síntese de alcoóis de cadeia longa, altamente ramificados. A convicção de Sita nas potencialidades comerciais do novo processo conduziu à criação da empresa *Precision Polyolefins* para a comercialização desta tecnologia.

(Adaptado de *Chemical & Engineering News* - <http://pubs.acs.org/cen/news/88/i07/8807notw4.html>,
acedido em 15/02/2010)

Paulo Brito

DESCOBERTA DO ELEMENTO 117

Na última década, o *Joint Institute for Nuclear Research* em Dubna, Rússia, descobriu os elementos 113, 114, 115, 116 e 118. Agora, num trabalho conjunto de investigadores russos e norte-americanos, foi anunciada a descoberta do elemento 117 (*Phys. Rev. Lett.* **104**(2010) 142502). A equipa estabeleceu a existência do elemento 117 por análise dos decaimentos observados após bombardeamento de berquélio com iões cálcio num ciclo-trão em Dubna. Depois de 5 meses de bombardeamento contínuo, os inves-

tigadores foram capazes de identificar apenas seis átomos do elemento 117. Segundo as leis internacionais, um laboratório só pode atribuir o nome a um novo elemento depois de um competidor repetir a descoberta, o que pode ainda levar anos para o elemento 117.

Desde 1940, a descoberta dos novos elementos tem sido tripartida: o laboratório de Berkeley (EUA) começou por dominar a área, reclamando a descoberta, isolada ou partilhada, de todos os elementos menos um desde o elemento 93 ao 106. Em 1981,

o *GSI Helmholtz Centre for Heavy Ion Research* em Darmstadt (Alemanha), reclamou a descoberta dos elementos 107 a 112, tendo este último sido recentemente designado por *copernicium*.

Desde 1940, 26 novos elementos depois do urânio foram adicionados à Tabela Periódica.

JM

A QUÍMICA NO CÉREBRO

RAQUEL B. DIAS^{1,2}

A transmissão de informação entre neurónios assenta na libertação de mediadores químicos – os neurotransmissores. É agora revista a contribuição de um químico orgânico para o estabelecimento do glutamato como principal neurotransmissor excitatório no cérebro.

Foi em 1791 que Luigi Galvani nos deu a conhecer a natureza eléctrica do impulso nervoso na junção neuro-muscular da rã, ao publicar o seu trabalho magistral, *De viribus electricitatis in motu musculari commentarius* [1]. Ferozmente contestada por Alessandro Volta [2], a sua teoria do Galvanismo, segundo a qual a “electricidade animal” dos tecidos biológicos lhes permitiria responder a estímulos externos, fez-se repercutir à escala global, tendo inclusive inspirado Mary Shelley a escrever *Frankenstein; or, The Modern Prometheus*, em 1817. De tal forma se enraizou na comunidade científica o conceito de bio-electricidade, que viria apenas a ser já no século XX demonstrada a ocorrência de transmissão nervosa por meio de mediadores químicos (Loewi, em 1921 [3]).

Foi assim identificado o primeiro neurotransmissor – a acetilcolina, a que Loewi chamou *Vagusstoff*. Como a própria designação sugere, os neurotransmissores são substâncias químicas endógenas que veiculam, amplificam e modulam sinais entre um neurónio e uma outra célula do corpo – outro neurónio ou uma fibra muscular, por exemplo. De facto, desempenham funções de cuja complexidade dificilmente se poderia suspeitar pela análise da sua estrutura química. Basta pensar que o glutamato, um simples aminoácido, é o principal neurotransmissor excitatório do cérebro.

O estudo da transmissão excitatória mediada pelo glutamato no sistema nervoso central iniciou-se na década de 1950, sensivelmente ao mesmo tempo em que a Neuroquímica dava os seus primeiros passos enquanto disciplina científica de pleno direito. É neste contexto que assume particular relevância o trabalho de Jeffrey Watkins.

Logo após acabar o seu doutoramento em Química Orgânica, foi-lhe atribuída a tarefa de testar os efeitos de diferentes substâncias químicas, previamente identificadas como constituintes do tecido cerebral, por forma a seleccionar candidatos adequados a neurotransmissores. Em conjunto com David Curtis e John Phillis, observou pela primeira vez o efeito excitatório, despolarizante, que o L-glutamato exercia em neurónios da medula espinal de gato [4]. Mas antes de avançarem com a hipótese de que o glutamato seria efectivamente um neurotransmissor, descobriram que ao usar outros aminoácidos desprotonados a pH fisiológico, como o D-glutamato ou o aspartato, obtinham um efeito bastante comparável, de potência quase equivalente, ao observado com

o L-glutamato. E como poderia o glutamato ser um neurotransmissor, se não possuísse receptores específicos através dos quais pudesse propagar sinais entre neurónios adjacentes?

Felizmente, Watkins lembrou-se de testar diferentes análogos sintéticos do glutamato e tentar correlacionar as suas estruturas com os respectivos efeitos elicitados em tecido cerebral.

Uma vez que as acções dos enantiómeros levógiro e dextrógiro do glutamato eram bastante equivalentes, Watkins optou por estudar análogos com substituintes mais volumosos, onde uma possível estereoselectividade pelo potencial receptor de glutamato se tornasse evidente. Uma destas substâncias, o N-metil-D-aspartato (MNDA) acabou por revelar um efeito excitatório consideravelmente superior ao do próprio L-glutamato, comprovando que teria realmente de existir um receptor para todos estes aminoácidos e seus derivados, cujo domínio de ligação apresentasse estereoselectividade responsável por efeitos de potência variável de acordo com o análogo usado.

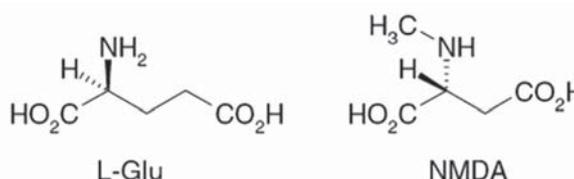


Figura 1 Comparação das estruturas dos aminoácidos parentes do ligando endógeno L-glutamato e do seu análogo sintético N-metil-D-aspartato

¹ Instituto de Farmacologia e Neurociências, Faculdade de Medicina, Universidade de Lisboa

² Unidade de Neurociências, Instituto de Medicina Molecular, Universidade de Lisboa

Foi assim proposto um modelo para o receptor de glutamato, em que os grupos carregados e polares do glutamato interagiriam com três domínios de ligação no receptor [5], desencadeando uma alteração conformacional responsável por abrir poros na membrana neuronal através dos quais o fluxo de iões sódio, de acordo com o gradiente, gerasse entrada de cargas positivas para a célula e a sua consequente despolarização. Sabe-se hoje que este domínio de ligação ao glutamato é formado por dois segmentos de polipéptidos do receptor (denominados S1 e S2), contendo os terminais amino de quatro hélices α , gerando um potencial electrostático consideravelmente negativo. Muito embora a carga do glutamato seja também negativa, esta destabilização é compensada pelo estabelecimento de pontes de hidrogénio, pontes salinas e interações electrostáticas entre ambos [6]. Assim, a afinidade e especificidade de ligação de diferentes ligandos ao receptor de glutamato é definida por este tipo de interações, que causam inclusive diferentes graus de fecho dos domínios de ligação, o que explica que alguns análogos de glutamato possam causar uma activação excessiva destes receptores, com consequências tóxicas para os neurónios.

De facto, para além do desenvolvimento de outros análogos sintéticos como o α -amino-3-hidroxi-5-metil-4-isoxazol-propionato (AMPA), que viria a revelar-se fundamental à elaboração de um sistema de classificação dos diferentes tipos de receptores para o glutamato de acordo com a sua afinidade para diferentes ligandos, foram ainda isolados potentes análogos do glutamato a partir de algas (kainato,

Digenia simplex) e plantas (quisqualato, *Quisqualis* spp). Da mesma forma e na sequência de um surto de intoxicações por ingestão de bivalves contaminados, na ilha Prince Edward, Canadá, em 1987, descobriu-se que uma toxina produzida por micro-algas, o ácido domóico, é capaz de activar os receptores para o glutamato com uma potência 30 a 100 vezes superior à do próprio ligando endógeno. Ao acumular-se nos bivalves que consomem estas algas, por sua vez consumidos por animais como humanos ou gaivotas, o ácido domóico leva a um aumento de função desreguladora de vias glutamatérgicas e, conseqüentemente, a sintomas de desorientação, amnésia, tremores, volatilidade emocional e mesmo danos neurológicos irreversíveis. Se considerarmos a estrutura química do ácido domóico, vemos que, à semelhança do kainato, possui um anel pirrolidínico, mas neste caso, com um grupo funcional de maiores dimensões, que funciona como uma cunha que se interpõe na estrutura definida pelo domínio de ligação ao glutamato do receptor.

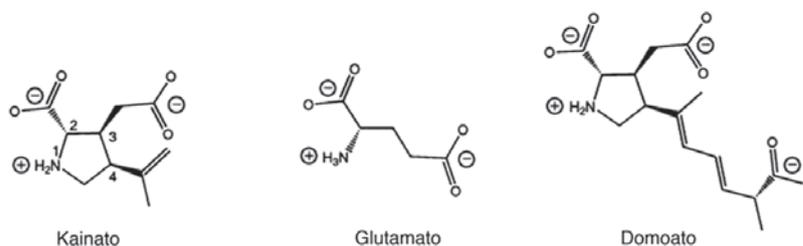


Figura 2 Estrutura de alguns agonistas de receptores para o glutamato (Adaptado de Armstrong *et al.* [6])

Curiosamente, os efeitos da intoxicação por ácido domóico já eram conhecidos em aves marinhas desde 1961, altura em que a cidade costeira de Capitola foi alvo de “ataques” por

bandos de pardelas negras enlouquecidas. Apesar da causa desta loucura colectiva ter ficado na altura por descobrir, o caso terá inspirado Daphne du Maurier a escrever a novela em que se baseou o famoso filme de Hitchcock, “os Pássaros”, de 1963.

REFERÊNCIAS

- [1] L. Galvani, “De viribus electricitatis in motu musculari commentarius”, *Bon. Sci. Art. Inst. Acad. Comm.* **7** (1971) 363-418.
- [2] A. Volta, “Le opere di Alessandro Volta” (edizione nazionale, 2 vols), 1918, Hoepli, Milano.
- [3] O. Loewi, “Über humorale Übertragbarkeit der Herznerven-wirkung”, *Pflügers Archiv.* **189** (1921) 239-242.
- [4] D. R. Curtis, J. W. Phillis, J. C. Watkins, “The chemical excitation of spinal neurones by certain acidic amino acids”, *J. Physiol.* **150** (1960) 656-682.
- [5] D. R. Curtis, J. C. Watkins, “The excitation and depression of spinal neurones by structurally related amino acids”, *J. Neurochem.* **6** (1960) 117-141.

- [6] N. Armstrong, Y. Sun, G.-Q. Chen, E. Gouaux, “Structure of a glutamate receptor ligand-binding core in complex with kainate”, *Nature* **395** (1998) 913-917.

ACTUALIDADE CIENTÍFICA

BATERIAS RECARREGÁVEIS DE LÍTIO: DESAFIOS

Tem sido notícia o esforço de várias marcas automóveis para lançarem carros eléctricos no mercado, enquadrado na procura de alternativas ao uso de combustíveis fósseis. Embora já haja automóveis híbridos em

circulação, procura-se investir em automóveis inteiramente eléctricos. Em particular, foi recentemente divulgada a intenção de uma marca em construir uma fábrica de baterias em Portugal. A bateria é, nesta altura, o elemento que limita a autonomia dos veículos automóveis, sendo por isso uma área onde se desenvolve um grande esfor-

ço de investigação. Como as baterias estão associadas à mobilidade, são também muito importantes para os telemóveis, computadores portáteis e outros equipamentos electrónicos.

Para este tipo de aplicação, o objectivo é conseguir baterias recarregáveis (também designadas por baterias se-

cundárias e idealmente capazes de sofrer um número “infinito” de ciclos de carga e descarga sem perda de performance), seguras, baratas, com elevada capacidade e com voltagem elevada. São de facto muitas características que se pretendem otimizar simultaneamente.

Uma pilha é constituída por um ânodo e um cátodo, estando estes dois eléctrodos separados por um electrólito que, permitindo o fluxo iónico entre os eléctrodos, não deve, no entanto, transportar electrões. No ânodo, o pólo negativo, ocorre uma oxidação, sendo os electrões transportados através de um circuito externo (onde realizam trabalho eléctrico e podem assim impulsionar o carro) até ao cátodo, o pólo positivo, onde ocorre uma redução que consome esses electrões. O papel do electrólito, nesta descrição simples, é fechar o circuito eléctrico, compensando a deslocação de electrões com a deslocação de iões (ver Figura 1). A força electromotriz da pilha é determinada pelos potenciais de redução dos eléctrodos. Este é o funcionamento das baterias (que combinam várias pilhas em série) de chumbo há muito usadas nos automóveis. Contudo, por possuírem um electrólito líquido (com ácido sulfúrico) e serem muito pesadas, nunca foram equacionadas como solução para o carro eléctrico.

testado em pilhas que usam electrólitos não aquosos. Contudo, a aplicação mais segura deste elemento em baterias envolve idealmente apenas o ião lítio, não devendo criar-se condições, por razões de segurança, para a formação de lítio metálico. Dado tratar-se do catião metálico mais pequeno, permite criar electrólitos em que este apresenta elevadas mobilidades. Note-se que a força electromotriz de uma pilha é determinada pelos potenciais dos eléctrodos mas a tensão que ela efectivamente cria, quando em funcionamento, e a energia que ela pode fornecer dependem da cinética dos processos de transferência electrónica e, mais importante, da mobilidade dos iões no electrólito. Estes têm que compensar a carga transportada pelos electrões que se movem muito rapidamente no circuito exterior à pilha. E a mobilidade dos iões é fortemente dependente do seu tamanho (de facto há um transporte de massa).

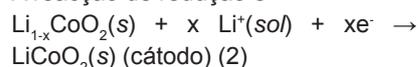
As pilhas recarregáveis de lítio são baseadas na movimentação do ião lítio entre dois eléctrodos, sendo a reacção principal a de intercalação/desintercalação do lítio nos dois eléctrodos. Em termos simples, tudo se passa como se, no processo de descarga, o ião lítio saísse de um eléctrodo, o ânodo, e fosse intercalar-se no cátodo. A movimentação deste ião é acompanhada de um fluxo de electrões, no circuito

de cobalto com lítio intercalado, como cátodo, separados por um electrólito não aquoso:

No processo de descarga, os iões lítio são libertados da grafite para o electrólito e, no cátodo, os iões lítio do electrólito são intercalados no óxido de cobalto. A reacção de oxidação é $\text{Li}_x\text{C}_6(\text{s}) \rightarrow x \text{Li}^+(\text{sol}) + 6 \text{C}(\text{s}) + x\text{e}^-$ (ânodo) (1)

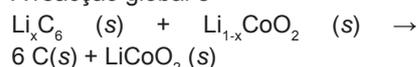
Nesta reacção o número de oxidação do lítio não se altera, e é o carbono que é formalmente oxidado.

A reacção de redução é



Nesta última reacção o número de oxidação formal do lítio não se altera, e é o cobalto que é reduzido.

A reacção global é



No processo de carga desta pilha, aplica-se uma tensão de sinal oposto à gerada por ela, ligando o pólo negativo de uma fonte ao eléctrodo de Li_xC_6 , que funciona agora como cátodo, o que obriga à ocorrência do processo inverso de (1), e o pólo positivo da fonte ao eléctrodo de $\text{LiCoO}_2(\text{s})$, promovendo o processo inverso de (2). A durabilidade da pilha deriva da completa reversibilidade destes processos de intercalação/desintercalação e da inexistência de reacções secundárias (por esta razão há pilhas comerciais que não devem ser recarregadas porque no processo de carga podem ocorrer reacções que libertem gases que provocam a explosão das pilhas). Estas pilhas de ião lítio são actualmente as mais usadas em computadores portáteis, telemóveis e as que estão a ser desenvolvidas para o fabrico do carro eléctrico.

Face à actualidade e interesse desta tecnologia, foi recentemente publicado um artigo de revisão (*Chemistry of Materials* 22 (2010) 587-603) em que se discutem os desafios actuais, tendo em vista a aplicação das baterias recarregáveis de ião lítio em veículos eléctricos. São abordados os desafios dos vários componentes, conforme se mostra na Figura 2.

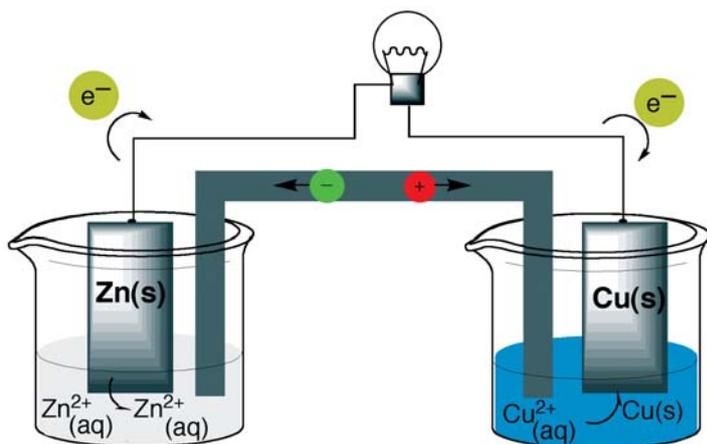


Figura 1 Pilha de Daniell. Neste caso, como não se pode usar um electrólito comum aos dois eléctrodos, usa-se uma ponte salina (gel com sal iónico dissolvido) que assegura a condutividade iónica entre os dois eléctrodos

O lítio, por possuir um potencial de redução muito negativo (sendo fácil de oxidar, o que o torna muito reactivo, não podendo por exemplo contactar com água por reagir violentamente com esta), pode originar pilhas com elevada força electromotriz, tendo sido

exterior, no mesmo sentido. Note-se que no electrólito ideal para esta pilha só os iões lítio devem ser móveis. A título de exemplo, consideremos a pilha de ião lítio mais simples, constituída por grafite intercalada com lítio, funcionando como ânodo, e um óxido

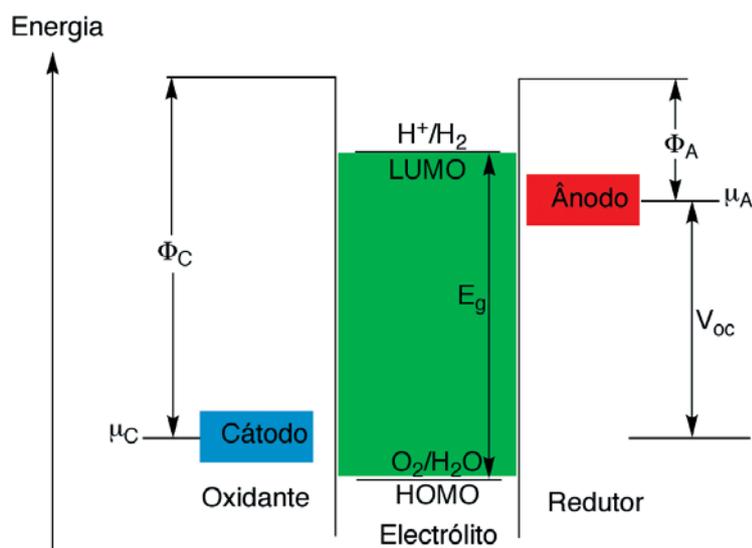


Figura 2 Esquema de uma pilha em circuito aberto, em que se especificam as funções de trabalho dos electrodos (Φ_A e Φ_C) e os potenciais electroquímicos (μ_A e μ_C) ou energias de Fermi ϵ_F e a força electromotriz, V_{oc} . (Adaptado de *Chemistry of Materials* 22 (2010) 587-603))

No esquema da Figura 2 considera-se um electrólito aquoso, sendo evidenciada a janela de estabilidade electroquímica, E_g , da água. Se o ânodo tiver um potencial electroquímico acima do nível H^+/H_2 (ou, mais genericamente, da LUMO - orbital molecular não ocupada de menor energia - de um outro electrólito), provoca a redução do electrólito ($H^+ + e^- \rightarrow 1/2 H_2$) (a menos que seja criada uma barreira de passivação entre eles que impeça a transferência electrónica). Se o cátodo tiver um potencial electroquímico abaixo do potencial do par O_2/H_2O (ou abaixo da HOMO - orbital molecular ocupada de mais alta energia - do electrólito), provocará a oxidação do electrólito ($2H_2O \rightarrow O_2 + 4H^+ + 4e^-$) (a menos que seja criada uma barreira de passivação entre eles que impeça a transferência electrónica). Ou seja, na ausência de camadas de passivação, o electrólito será estável desde que os potenciais electroquímicos de ânodo e cátodo estejam dentro da janela de estabilidade electroquímica do electrólito. No caso das pilhas de ião lítio, a água não pode ser usada por não satisfazer este requisito de estabilidade. A densidade de energia de uma pilha é dada pelo produto da tensão em circuito aberto (força electromotriz, V_{oc}) pela capacidade de transferência de carga reversível por unidade de massa. Os desafios que se colocam ao desenvolvimento de uma bateria de lítio recarregável para o mercado dos veículos automóveis são: a identificação de materiais baratos e ambientalmente benignos para

os componentes das pilhas, i.e., (1) um electrólito não aquoso com elevada condutividade por ião Li^+ na gama de temperaturas entre $-40\text{ }^\circ\text{C}$ e $60\text{ }^\circ\text{C}$; (2) ânodo e (3) cátodo com valores de μ_A e μ_C adequados à janela de estabilidade do electrólito e permitindo ambos os electrodos ciclos de carga/descarga rápidos com elevada capacidade reversível.

Electrodos - Os materiais de electrodo são optimizados em relação aos valores de μ_A e μ_C , tendo em conta o posicionamento energético da LUMO e HOMO do electrólito, tendo, além disso, que ser quimicamente estáveis quando em contacto com o electrólito. Os electrodos práticos desenvolvidos até hoje são essencialmente constituídos por uma estrutura hospedeira na/da qual os iões lítio são inseridos/extraídos. Como materiais hospedeiros para inserção de lítio têm sido estudados a grafite ou carvão desordenado e outros elementos (como o silício); óxidos e sulfuretos de metais de transição (Li_xTiS_2 e Li_xCoO_2 , com estruturas em camadas, espinelas $[Ti_2]S_4$, e Li_xCoPO_4) e compostos em que ocorrem reacções de deslocamento de lítio (substituição de um elemento de um composto ou liga, como foi demonstrado com a substituição do ferro em Fe_3O_4 por inserção de lítio). Dos materiais até agora estudados do lado do ânodo, será difícil encontrar um que permita maior capacidade que o carbono embora este tenha uma baixa velocidade de carga; do lado do cátodo

falta ainda encontrar um material que permita maximizar a voltagem e capacidade das células.

Electrólitos - Além de possuir uma grande janela de estabilidade electroquímica, Eg, o electrólito deve ainda satisfazer outros requisitos, como a manutenção de uma boa qualidade de interface com os electrodos (acomodando as variações de volume que acompanham a inserção/desinserção de lítio), uma elevada condutividade iónica, apenas por Li^+ , e desprezável condutividade electrónica, e estabilidade química na gama de temperaturas de $-40\text{ }^\circ\text{C}$ a $60\text{ }^\circ\text{C}$ e por contacto com os electrodos. Deve, além disso, ser seguro (de preferência não deve ser inflamável nem explosivo caso ocorra um curto-circuito) e ter baixa toxicidade e baixo custo. Entre os electrólitos estudados, estão os líquidos orgânicos, em especial os que se baseiam em carbonatos (carbonato de propileno e carbonato etilmetílico, por exemplo); líquidos iónicos (como os sais de imidazole que, contudo, têm uma baixa estabilidade electroquímica e nos quais a mobilidade do Li^+ é pequena); electrólitos líquidos inorgânicos; electrólitos poliméricos sólidos, como por exemplo os baseados em misturas de poli(óxido de etileno) e sais de lítio ($LiPF_6$ ou $LiAsF_6$), mas que possuem uma moderada mobilidade do ião Li^+ ; electrólitos sólidos inorgânicos, que possuem uma janela de estabilidade electroquímica larga, mas que foram excluídos das aplicações em grande escala destas baterias por terem problemas com a instabilidade da interface com os electrodos; e os sistemas electrólitos mistos, que combinam líquidos orgânicos, líquidos iónicos, electrólitos poliméricos e/ou electrólitos sólidos inorgânicos. Apesar da enorme quantidade de estudos já efectuados não parece ter sido ainda encontrado o electrólito ideal, que cumpra todos os requisitos acima referidos. Em conclusão, embora existam já no mercado baterias recarregáveis de ião lítio e sejam estas as eleitas para os veículos eléctricos, e embora haja já uma vasta quantidade de materiais para os seus componentes, não foram ainda encontrados os que cumprem todos os requisitos identificados como necessários para optimizar estas baterias.

Jorge Morgado

LEVANTAMENTO DA PRODUÇÃO CIENTÍFICA MUNDIAL E IBÉRICA NO CAMPO DOS NANOTUBOS DE CARBONO

RICARDO SILVA¹, MARGARIDA AMARAL^{2,3}, DIOGO MATA^{1,4},
RUI F. SILVA^{1,4}, PEDRO M. F. J. COSTA^{1,4,*}

Os nanotubos de carbono (CNTs) são estruturas alongadas e monoelementares de dimensões nanométricas e com elevado potencial científico-tecnológico. Enquadrados na classe dos nanomateriais, tem-se verificado um enorme interesse pelo seu estudo desde a sua (re)descoberta em 1991 [1].

Neste trabalho, procedeu-se a um levantamento das publicações científicas e patentes relacionadas com CNTs a nível mundial com o intuito de compreender o volume de trabalho efectuado em quase duas décadas de investigação. Juntamente, analisou-se qual a situação presente em Portugal a este respeito. Como termo comparativo regional, escolheu-se Espanha, o país geograficamente mais próximo e possivelmente mais relevante no que toca a colaborações e investimento conjunto em Investigação e Desenvolvimento (I&D).

Verifica-se que em Portugal a investigação científica em CNTs se encontra bastante aquém da tendência internacional e nitidamente menos desenvolvida do que no país vizinho. Neste, em conformidade com a situação mundial, tem-se registado um volume de trabalho crescente e de carácter progressivo desde 1994, o qual culminou recentemente com a atribuição de diversas patentes.

INTRODUÇÃO

A descoberta dos CNTs encontra-se envolvida em controvérsia [2]. Todavia, desde o artigo fundamental de Sumio Iijima [1] que os CNTs têm instigado globalmente uma enorme curiosidade em químicos, bioquímicos, físicos, engenheiros, etc. Muito desse interesse advém das características únicas destes alótropos de carbono os quais apresentam propriedades excepcionais ao nível electrónico, óptico, mecânico e térmico [3].

Estruturalmente, a rede cristalina dos CNTs é exclusivamente composta por ligações carbono-carbono envolvendo hibridações do tipo sp^2 . Sendo constituídos por uma ou mais folhas de grafeno enroladas, apresentam uma estrutura tubular de cilindros concêntricos com espaçamento entre si de $\sim 3,4$ Å. Os CNTs são bastante resistentes a ataques químicos e apresentam uma estabilidade estrutural

notável quando sujeitos a condições adversas de pressão, temperatura ou irradiação com feixes de partículas altamente energéticas [3]. No que se refere às suas propriedades eléctricas, elas podem variar, pois, consoante a forma como a folha de grafeno é enrolada, estes podem ter um carácter metálico ou semiconductor (de particular relevância para os CNTs com uma ou duas folhas). As suas propriedades mecânicas são também causa de grande interesse. Por exemplo, embora tenham uma elevada tensão de ruptura de ~ 63 GPa (50 vezes maior que a do aço), os nanotubos de folha simples (SWCNTs) são flexíveis (suportam uma notável deformação elástica, i.e. com recuperação da forma inicial) e possuem um elevado módulo de Young (~ 1 TPa) [3]. Para além destas características intrínsecas, estes nanotubos são bastante versáteis podendo ser usados, por exemplo, como moldes para cristais de reduzida dimensão [4].

O presente trabalho surgiu da necessidade de conhecer o panorama nacional da I&D em CNTs. Neste âmbito, os volumes de produção científica em

Portugal foram enquadrados tendo como referência, em particular, a produção espanhola e, em geral, a produção mundial.

METODOLOGIA

O levantamento das publicações científicas e patentes relacionadas com nanotubos de carbono foi realizado recorrendo à base de dados electrónica ISI *Web of Knowledge* (WoK) [5] e utilizando como palavra-chave “carbon nanotube*”, onde * é uma *wild-card* que representa qualquer letra ou grupo de letras. A palavra-chave foi introduzida no campo “Topic” para as publicações e no campo “Title” para as patentes. Na questão das patentes, esta pesquisa foi também efectuada no portal *Free Patents Online* [6] com o objectivo de confirmar os resultados obtidos com a WoK- *Derwent Innovations Index*. O estudo incidiu sobre vários critérios nos quais se incluem ano de publicação, autores, citações, país e/ou instituição de origem. No caso da literatura científica contabilizaram-se tanto as publicações regulares em jornais científicos (artigos) como aquelas derivadas de comunicações em con-

¹ Departamento de Engenharia de Cerâmica e Vidro, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro

² Departamento de Física, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro

³ I3N, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro

⁴ CICECO, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro

* email: pedromfjcosta@ua.pt

gressos (*proceedings*) incluídas na *Web of Science* (base de dados integrada na WoK). Para as patentes, no caso mundial, contabilizaram-se todas aquelas identificadas pela WoK e seguidamente confirmadas na *Free Patents Online*. No que respeita aos casos específicos de Portugal e Espanha a busca restringiu-se apenas àquelas para as quais a instituição detentora da patente se encontrava sediada nestes países. Para tal foi necessário utilizar um filtro adicional (campo "Patent Number" = ES* ou PT*).

O presente texto encontra-se dividido em duas categorias: a primeira refere-se ao panorama mundial, englobando tanto a produção de literatura científica como de patentes; na segunda parte, incluíram-se os dados respeitantes a Portugal e Espanha. Os resultados são apresentados sob a forma de gráficos ou tabelas.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

PRODUÇÃO CIENTÍFICA MUNDIAL

Literatura (artigos e *proceedings*)

Considera-se que os nanotubos de carbono foram parcialmente responsáveis por desencadear a revolução Nanotecnológica nos anos de 1990 [7]. De facto, desde o estudo de lijima [1], o campo dos CNTs desenvolveu-se de tal maneira que estes se tornaram num dos materiais mais intensamente estudados pela Ciência. Este fenomenal empenho é claramente demonstrado pelo número crescente de publicações científicas produzidas anualmente desde 1991 (Fig. 1). No

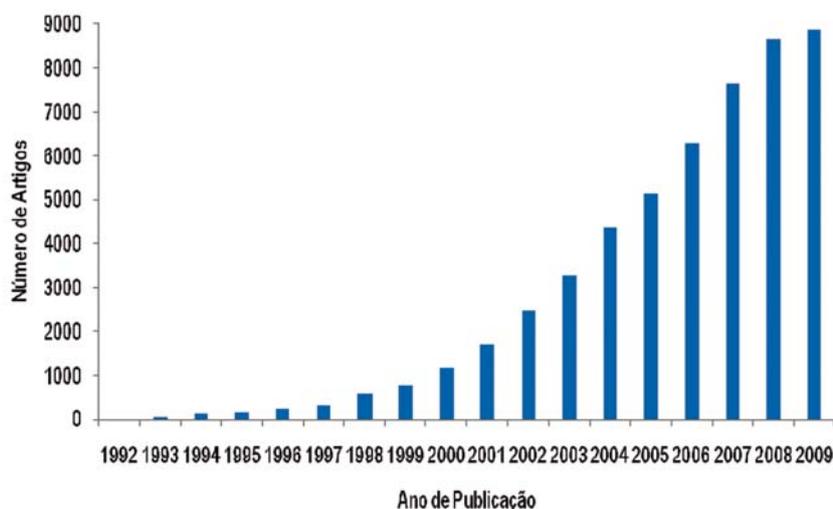


Figura 1 Evolução do número de publicações científicas relacionadas com CNTs. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

intervalo de 1991 a 2009, o cumulativo dos estudos em CNTs perfaz um total de mais de 50000 artigos e actas de conferências (*proceedings*). Um tal volume de literatura produzido em tão reduzido intervalo de tempo é inaudito para materiais de carbono e extremamente raro para qualquer outra substância.

Segundo os dados apresentados na Fig. 1, o empenho dos investigadores não esmoreceu ainda apesar do enorme volume de trabalho já efectuado. Usualmente tem-se representado a génese e evolução de novas tecnologias (ou ideias) como seguindo uma tendência de interesse e desenvolvi-

mento caracterizada por uma curva em S, tal como é ilustrado na Fig. 2 (em inglês). Comparando esta curva com os dados extraídos da WoK, verifica-se que o reconhecimento do potencial destas nanoestruturas terá ocorrido por volta do ano 2000. Neste momento, e face ao crescimento contínuo observado, o campo permanece na rampa de elevada progressão científica. No entanto, considerando a descoberta do grafeno em 2004, é possível que brevemente os CNTs entrem num estágio de maturidade (à semelhança do que aconteceu com o campo dos fulerenos com a descoberta dos nanotubos).

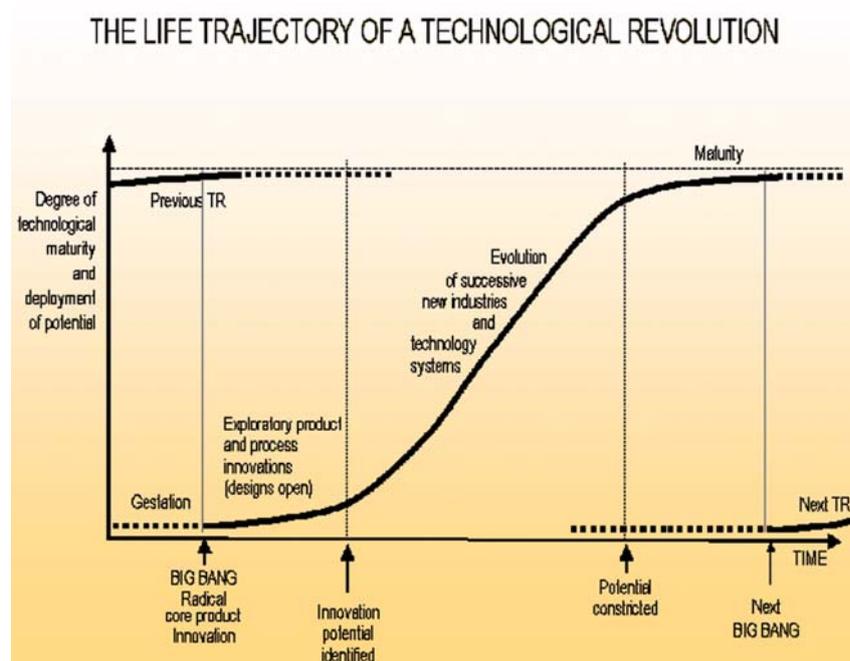


Figura 2 Gráfico característico do ciclo de vida de uma revolução tecnológica. Retirado de <http://www.oxfamblogs.org/fp2p/?cat=58> à data de 02/12/2009

Face à elevada quantidade de publicações do campo, é pertinente averiguar quais as que se destacam. O impacto de uma publicação pode ser avaliado pelo número de vezes que é referida por outros artigos e *proceedings* (citações). Assim, no culminar de quase duas décadas de esforço internacional, aparecem vários trabalhos que se distinguem pela sua repercussão. Os dez estudos-chave do campo dos CNTs (top-10) encontram-se listados na Tabela 1. Excepcionalmente, a procura pela palavra-chave "carbon nanotube*" não identificou o artigo de Sumio lijima datado de 1991. Tal facto é justificado por a denominação "nanotubos de carbono" ter surgido na literatura apenas a partir de 1992

[8]. Examinando o disposto na Tabela 1, verifica-se que o artigo pioneiro de Iijima (1991) apresenta mais de 9000 citações, sensivelmente 3 vezes mais que o segundo classificado. Em comparação, o artigo de H. W. Kroto *et al.* [9], que revelou a existência dos fulerenos (C_{60}) e pelo qual esta equipa recebeu o Prémio Nobel de Química em 1996, tinha um total de 6643 citações à data de 16 de Janeiro de 2010. É também interessante o número reduzido de jornais presentes na lista. O domínio avassalador das revistas *Nature* e *Science* confirma o impacto que estes periódicos têm no processo de desenvolvimento da Ciência.

mente como um dos motores mundiais deste campo de I&D. De facto, se adicionarmos o volume de trabalho produzido na Formosa (a qual a R. P. China encara como parte integrante do seu território) então a produção de literatura científica fica quase igualada à dos EUA. Admirável também que o México, país com pouca tradição em I&D, nomeadamente em materiais de carbono, apareça neste lote. Uma possível justificação prende-se com a presença de algumas equipas de renome mundial tais como as dirigidas pelos irmãos Terrones no IPICYT. Portugal, com o dobro da população de Singapura e com um produto interno

Se estendermos a pesquisa anterior e agruparmos os países por continentes, verifica-se que é na Ásia que se encontra o grosso do trabalho realizado até hoje (Fig. 4). A Europa (onde se inclui a Rússia) aproxima-se do volume de publicações das Américas (Norte, Central e Sul) mas ambas ficam notavelmente atrás do esforço asiático. De novo, este é um dado interessante visto que até há relativamente pouco tempo apenas o Japão era encarado como um país produtor de I&D em todo o continente asiático.

Tabela 1 As dez publicações científicas mais citadas, a nível mundial, no campo dos CNTs. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

Citações	Autores	Referência
9098	S. Iijima <i>et al.</i>	Nature 354 (1991), 56
2995	A. Thess <i>et al.</i>	Science 273 (1996), 483
2672	S. J. Trans <i>et al.</i>	Nature 393 (1998), 49
2611	R. H. Baughman <i>et al.</i>	Science 297 (2002), 787
2283	J. Kong <i>et al.</i>	Science 287 (2000), 622
2055	S. Iijima <i>et al.</i>	Nature 363 (1993), 603
1910	A. C. Dillon <i>et al.</i>	Nature 386 (1997), 377
1884	W. A. Deheer <i>et al.</i>	Science 270 (1995), 1179
1853	M. M. J. Treacy <i>et al.</i>	Nature 381 (1996), 678
1814	E. W. Wong <i>et al.</i>	Science 277 (1997), 1971

Numa época caracterizada pela procura incessante de Conhecimento e Inovação, onde as actividades de I&D são extremamente competitivas e globais, pretendeu-se conhecer quais os países e regiões mundiais que maior empenho têm demonstrado na progressão do campo dos CNTs. Segundo os dados da Fig. 3, os EUA, com mais de 14500 artigos e *proceedings*, são responsáveis pela maior fatia do trabalho científico. Bastante próxima, a República Popular da China conta com mais de 11000 publicações. Segue-lhes, em terceiro lugar, o Japão com vários milhares de estudos. Curiosamente, neste top-20 encontram-se países tão diversos como a Coreia do Sul e o México. O volume de trabalho realizado em Portugal foi também incluído de forma a facilitar a leitura comparativa com o resto do mundo. Em particular, a posição da R. P. China é bastante interessante. Não sendo um país com tanta tradição de produção de Conhecimento como os EUA ou o Japão, revela-se actual-

bruto (PIB) per capita bastante mais elevado que a Polónia ou o México, fica bastante aquém dos países do top-20 mundial (Fig. 3). De facto, na análise realizada o nosso país aparece a ombrear com a Tailândia e a Malásia.

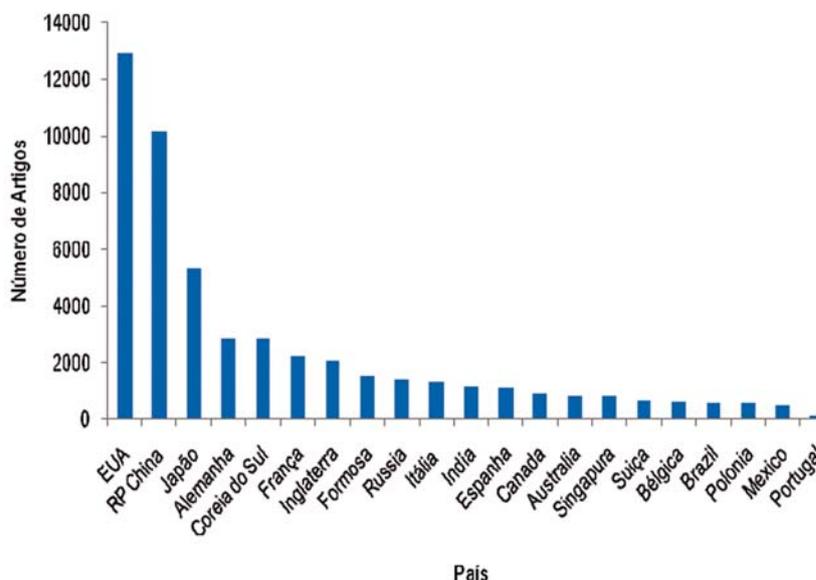


Figura 3 Publicações científicas relacionadas com CNTs distribuídas por país (top-20 mundial + Portugal). Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

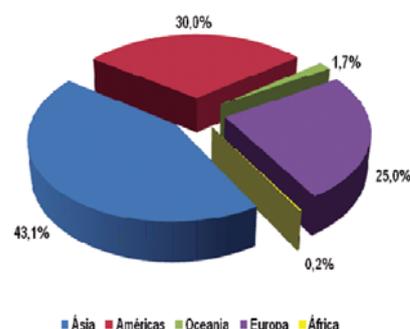


Figura 4 Distribuição da literatura científica sobre CNTs por continentes. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

Tendo em conta a disparidade observada entre o país com maior número de publicações e a região planetária mais produtiva, é pertinente fazer uma busca sobre as instituições por detrás deste esforço internacional. Desta forma, descobre-se que, apesar da liderança dos EUA, a *Chinese Academy of Science* (CAS) é a instituição que mais publicou até hoje (Fig. 5). Demonstrando um desenvolvimento ímpar neste campo, destaca-se visivel-

mente de qualquer outra instituição. Todavia, é necessário alertar para as diferenças entre os vários tipos de instituições presentes nesta lista. A CAS é, na realidade, constituída por mais de cem institutos de investigação, uma universidade e uma escola de pós-graduação. Os seus recursos humanos, que incluem milhares de investigadores doutorados, são muitíssimo mais extensos do que a média das universidades. Numa situação semelhante estão outras instituições, também elas redes nacionais de laboratórios, como sejam a *Russian Academy of Science* (RAS), o *Centre National de la Recherche Scientifique* (CNRS) e a *National Aeronautics and Space Administration* (NASA). Surpreendente é, de facto, como existem universidades que, porventura com dotações orçamentais mais reduzidas, conseguem competir com estas redes de laboratórios. No top-5 das instituições aparecem assim três universidades. Destas, a *Tsing Hua University*, localizada em Pequim, aparece à frente de duas das mais conceituadas instituições académicas dos EUA, a *Rice University* e o *Massachusetts Institute of Technology* (MIT).

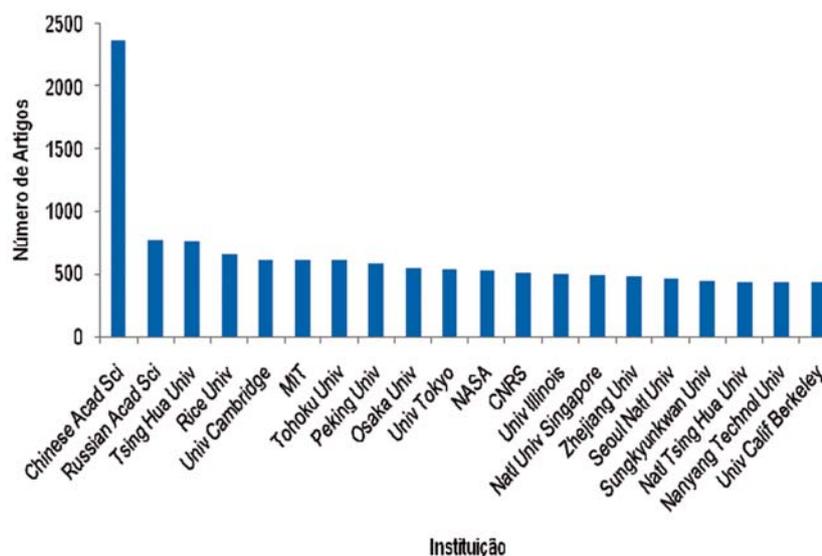


Figura 5 Publicações científicas relacionadas com CNTs ordenadas por instituição. Pesquisa à data de 16/01/2010

Patentes

Uma patente é um documento oficial emitido por um Estado soberano que reconhece, temporariamente, um conjunto de direitos exclusivos aos inventores (e demais titulares) de um novo produto ou criação. Em troca, o detentor da patente deve tornar

públicos os detalhes referentes à invenção, bem como as suas reivindicações em matéria de I&D. A protecção de uma invenção através de patentes transforma-a num bem negociável não só para instituições académicas como para empresas. Desta maneira, a transferência de tecnologia sob a forma de licenças proporciona ganhos financeiros, o que incentiva a busca

De acordo com a Fig. 6, o número de patentes registadas mundialmente e cujo título contém “carbon nanotube*” conheceu um crescimento notório a partir de 1999. A este respeito é notável o incremento de mais de 75% na comparação das patentes relativas ao ano de 2007 (746) com aquelas de 2009 (1317). Cumulativamente, encontram-se 5688 registos de pa-

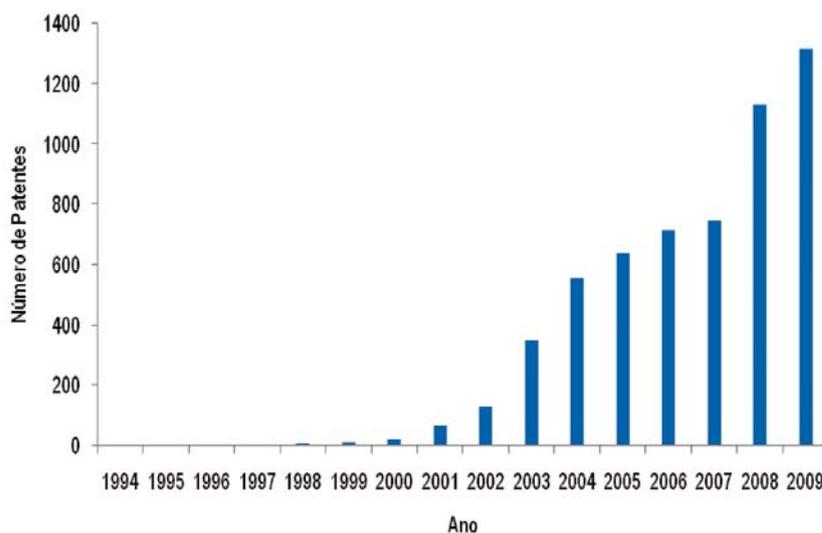


Figura 6 Evolução do número de patentes relacionadas com CNTs. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

tentes relacionadas com CNTs nas bases de dados utilizadas. Note-se que foram necessários apenas 3 anos desde a publicação do primeiro artigo de CNTs para surgirem os primeiros registos de patentes (JP6280116-A, JP2845675-B2 e US5346683-A). O início da corrida de propriedade intelectual deu-se através do *Gas Research Institute* (US) e da *NEC* (JP). A forma célere como aparecem estas primeiras patentes ilustra bem como houve uma aposta nas potencialidades deste campo logo desde o seu início. Todavia, foram necessários mais de 7 anos para se consolidar esta corrida. Assim, apenas a partir de 1998 se encontra uma progressão constante de registos de patentes. Tal poderá resultar da evolução de uma área científica de alto impacto ser inicialmente dominada por questões de Ciência fundamental. Este ímpeto de propriedade intelectual mereceu a atenção de Baughman *et al.* num artigo publicado em 2002 [10]. Neste estudo foi sugerida a divisão das patentes então registadas nas áreas referidas na Fig. 7. Todavia, os autores

advertiram que esta classificação era necessariamente subjectiva e portanto deveria funcionar apenas como um guia. Dado o grande número de patentes registadas desde este estudo e os erros que uma análise deste género comportaria, a actualização deste gráfico não foi realizada.

adicional resulta das diferentes designações para a mesma instituição: o *National Institute of Advanced Science and Technology* do Japão (AIST), aparece seja em inglês, seja na designação em japonês (*Dokuritsu Gyosei Hojin Sangyo Gijutsuso*). Refira-se ainda que a Intel, um outro colosso

a constituição do *Tsinghua-Foxconn Nanotechnology Research Center* em 2007, o qual alberga várias equipas dedicadas exclusivamente ao estudo de CNTs. De qualquer forma, neste top-10 mundial é visível o domínio das companhias multinacionais com sede no continente asiático, o que mais uma vez corrobora a forte influência da Ásia no campo dos nanotubos de carbono.

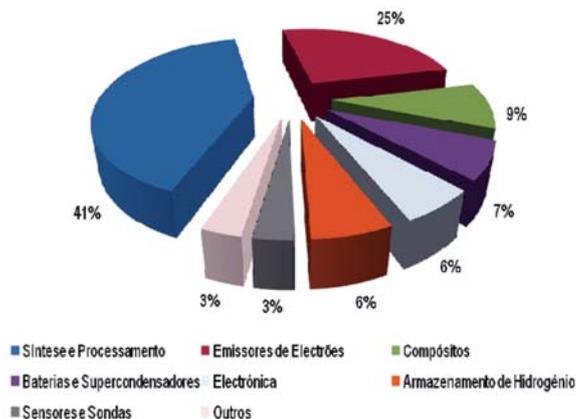


Figura 7 Principais áreas de registo de patentes relacionadas com CNTs (adaptado de [10])

No exame do panorama internacional de registo de patentes é também relevante tentar perceber quais os principais intervenientes neste campo. Por conseguinte, foi efectuada uma pesquisa de patentes por instituição detentora. O resultado, apresentado na Fig. 8, contém algumas surpresas. De facto, a principal detentora de propriedade intelectual relacionada com CNTs a nível mundial é a Foxconn, com 438 registos. Embora desconhecido do grande público ocidental, Foxconn é o nome comercial de um conglomerado formado por diversas empresas chinesas a principal das quais é a *Hon Hai Precision Industries Company Ltd*. Com sede na Formosa, a Foxconn é o maior produtor mundial de componentes electrónicos e informáticos sendo responsável pelo fabrico (e por vezes desenvolvimento) de produtos tão diversos como os telemóveis de última geração iPhone (Apple) ou as consolas de jogos Wii (Nintendo), Xbox 360 (Microsoft) e PlayStation (Sony). A segunda classificada é a multinacional sul-coreana Samsung, também ela um gigante mundial da electrónica, com 299 patentes. Refira-se que tanto para a Foxconn como para a Samsung foi necessário adicionar as patentes de cada uma das suas subsidiárias (por exemplo, *Samsung Sdi Co Ltd*, *Samsung Electronics Co Ltd* e *Samsung Denkan KK*). Um problema

da electrónica e informática mundial, é a única empresa ocidental do top-10, embora bastante distanciada das duas primeiras classificadas.

Finalmente, importa referir a presença das duas únicas instituições académicas no top-10 mundial: a Universidade de Tsing Hua e a *Rice University*. Relativamente à primeira, e em consonância com a produção de literatura científica (terceira classificada mundialmente), a Tsing Hua (por vezes referida localmente como o “MIT” chinês) regista um impressionante volume de propriedade intelectual. Para tal poderá ter contribuído

PRODUÇÃO CIENTÍFICA IBÉRICA

Na sequência dos resultados anteriores pretendeu-se verificar se a situação em Portugal seguia a tendência global. Todavia, uma vez que por questões várias é difícil relacionar directamente o trabalho nacional com o mundial, tentou-se encontrar um outro termo de comparação que pudesse oferecer uma visão mais localizada. Por essa razão, escolheu-se o país vizinho, a Espanha. Nas seguintes secções apresentar-se-ão os dados extraídos da WoK relativos à evolução do estudo de CNTs na Península Ibérica.

Literatura (artigos e proceedings)

Previamente, no gráfico da Fig. 3, observou-se que a Espanha tinha um volume de literatura científica produzido no intervalo de 1991 a 2009 maior que o de Portugal. Analisando agora em detalhe este resultado, tal como ilustrado na Fig. 9, verifica-se que em Espanha tem ocorrido um crescimento progressivo do estudo de CNTs desde 1994, 3 anos após a sua descoberta. Contrariamente, Portugal apresenta

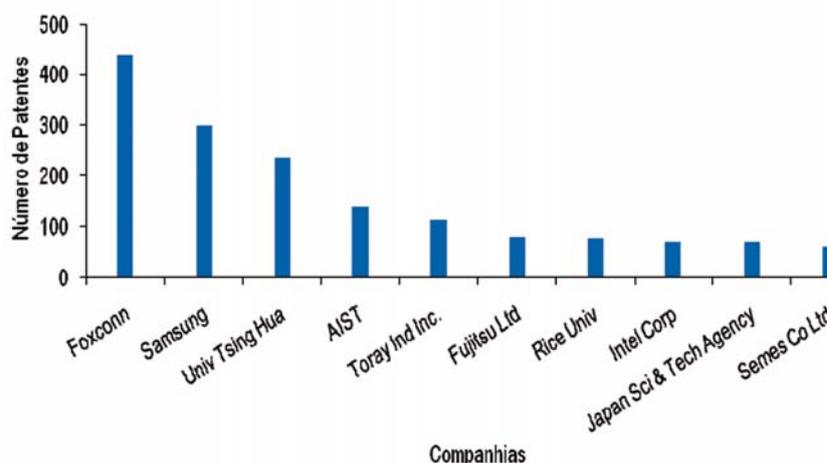


Figura 8 Top-10 mundial do registo de patentes relacionadas com CNTs. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

um número incipiente e irregular de publicações neste intervalo de tempo. A manifesta diferença entre os dois países poderá sobrevir das dimensões e maturidade das respectivas comunidades científicas.

Todavia no biénio de 2008-09 parece finalmente ter surgido uma alteração deste panorama com recordes sucessivos de publicações em Portugal (33 em 2008 e 41 em 2009). Não obstante, a irregularidade passada e o arranque tardio poderão denotar uma incapacidade para o nosso país se posicionar rapidamente em novos campos de Ciência. Seria porventura interessante verificar se esta tendência também se aplica a outros campos surgidos na última década.

Tal como efectuado anteriormente, o passo seguinte foi descobrir quais as instituições que mais contribuíram para o esforço ibérico. Neste caso, as instituições foram organizadas por país e são apresentadas em separado.

Assim, no caso de Espanha, o gráfico de barras da Fig. 10, mostra que o *Consejo Superior de Investigaciones Científicas* (CSIC) se destaca visivelmente. Refira-se que, à semelhança do CNRS ou da CAS, esta organização é constituída por uma rede de laboratórios de investigação distribuídos por todo o território espanhol, o que justificará a enorme diferença observada.

No caso das outras instituições, a produção é semelhante sendo que apenas a Universidade Autónoma de Madrid ultrapassou a fasquia da centena de estudos até ao presente.

Dos estudos publicados em Espanha, foi averiguado quais os de maior impacto.

A Tabela 2 apresenta não só a referência mas também o título das publicações. Involuntariamente, observa-se que o top-5 das citações é constituído maioritariamente por publicações relativas a estudos de carácter teórico. Em três destas, são co-autores A. Rubio e P. Ordejon, possivelmente os investigadores mais influentes do campo em Espanha.

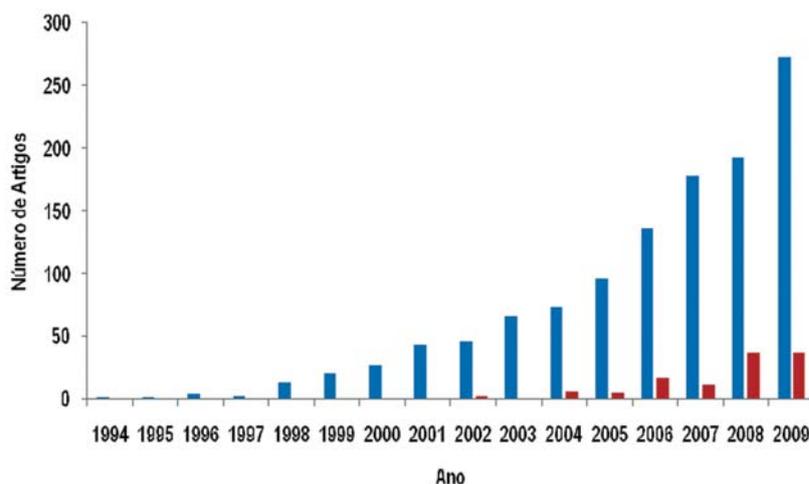


Figura 9 Evolução do número de publicações científicas relacionadas com CNTs no período de 1991 a 2009, em Espanha (a azul) e Portugal (a vermelho). Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

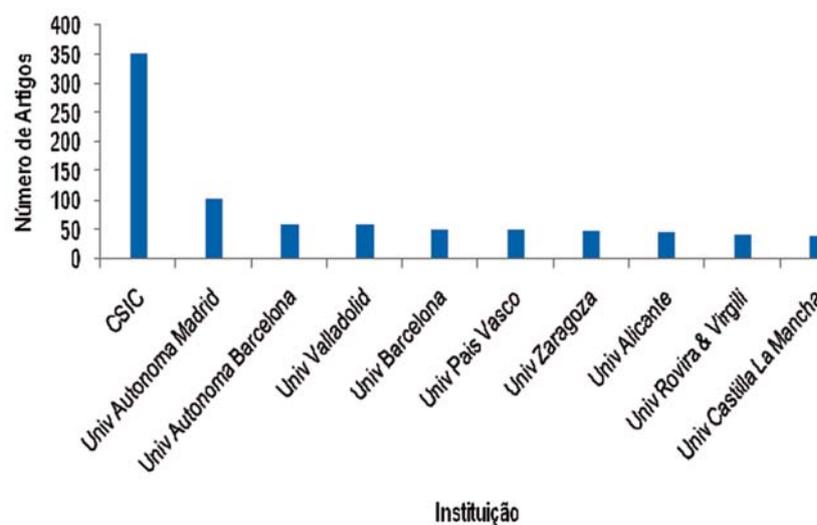


Figura 10 Distribuição das publicações científicas relacionadas com CNTs produzidas em Espanha por instituição. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

Tabela 2 Top-5 das publicações científicas mais citadas com (co-)autoria em Espanha. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

Cit.	Autores	Título	Referência
661	M. Brandbyge <i>et al.</i>	Density functional method for non-equilibrium electron transport	Phys. Rev. B 65 (2002) 1098
546	P. M. Ajayan <i>et al.</i>	Single-walled carbon nanotube-polymer composites: strength and weakness	Adv. Mater. 12 (2000) 750
526	E. Hernandez <i>et al.</i>	Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes	Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 4502
427	E. Artacho <i>et al.</i>	Linear-scaling ab initio calculations for large and complex systems	Phys. Stat. Sol. B 215 (1999) 809
401	D. Sanchez-Portal <i>et al.</i>	Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes	Phys. Rev. B 59 (1999) 12678

No que se refere à produção de literatura científica em Portugal, a distribuição por instituição revela que o panorama nacional é bastante equilibrado (Fig. 11).

Por um lado, no sistema científico nacional não existem organismos como o CSIC ou o CNRS. Por outro, o reduzido volume de trabalho traduz uma provável ausência de grupos de investigação exclusivamente dedicados a este tema. De qualquer forma, o esforço realizado até hoje provém essencialmente das regiões Centro e Norte.

Das publicações com origem em Portugal, o top-5 ordenado por citações é constituído exclusivamente por estudos de carácter experimental, tal como referenciado na Tabela 3. É importante também mencionar que a primeira alusão a CNTs num trabalho português data de 1996 e teve origem na Universidade do Porto [11].

Patentes

O estudo das patentes com origem na Península Ibérica revelou um cenário algo desolador. De facto, apenas foram encontrados quatro registos, todos provindos de Espanha (ver Tabela 4). Para um cumulativo que ultrapassa o milhar de publicações em Espanha, a reduzida dimensão e novidade destes registos (datados de 2008 e 2009) deriva talvez do carácter de investigação feita (teórico em detrimento do experimental).

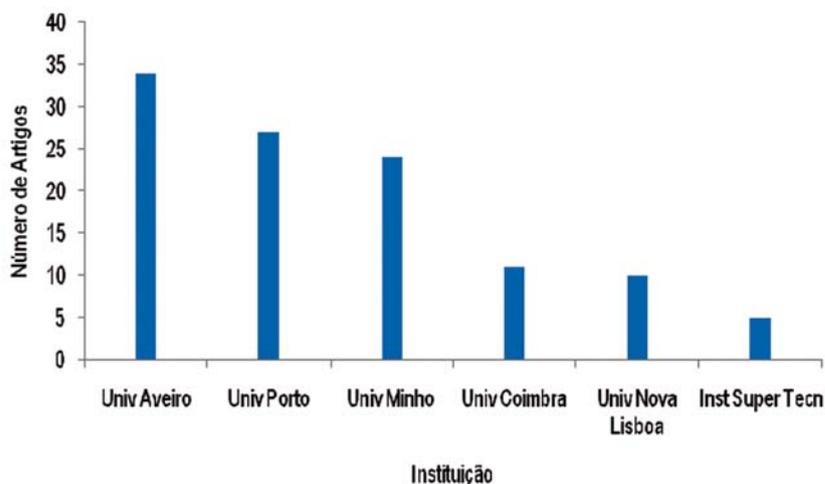


Figura 11 Distribuição de estudos sobre CNTs com (co-)autoria em Portugal por instituição. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

Tabela 3 Top-5 dos estudos sobre CNTs mais citados com (co-)autoria portuguesa. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010

Cit.	Autores	Título	Referência
149	J. J. Davis <i>et al.</i>	The immobilization of proteins in carbon nanotubes	Inorg. Chim. Acta 272 (2849) 261
77	M. C. Paiva <i>et al.</i>	Mechanical and morphological characterization of polymer-carbon nanocomposites from functionalized carbon nanotubes	Carbon 42 (2004) 2849
56	W. D. Wang <i>et al.</i>	Photocatalytic degradation of phenol on MWNT and titania composite catalysts by a modified sol-gel method	App. Catal. B 56 (2005) 305
46	C. Baleizão <i>et al.</i>	Chiral vanadyl salen anchored on support as recoverable catalysts for the enantioselective cyanosilylation of aldehydes. Comparison among silica, single wall carbon nanotube, activated carbon and imidazolium ion as support	Tetrah. Lett. 60 (2004) 10461
46	C. Baleizão <i>et al.</i>	Vanadyl salen complexes covalently anchored to single-walled carbon nanotubes as heterogeneous catalysts for the cyanosilylation of aldehydes	J. Catal. 221 (2004) 77

Tabela 4 Patentes relacionados com CNTs cujo detentor tem sede em Espanha. Pesquisa realizada à data de 16/01/2010. *Palavra-chave excepcionalmente introduzida no campo "Topic"

ano	Autores	Detentor	Título	Registo
2009	M. Cabanillas P. Lopez M. Miranda	CSIC	Dense and homogeneous ceramic material consisting of carbon/silicon nitride nanotubes, production method and applications thereof.	ES000845
2009	R. Quesada C. Fernandez A. Coll C. Horna	CSIC	Method for defining and producing reactive chemical nanometric surface patterns by means of gaseous-phase soft lithography, resulting patterns and devices and uses thereof.	ES000221
2008	F. Ferrus S. Aparicio G. Paravano J. Rusell	Univ. Rovira I Virgili	Electrodes selective for solid-contact ions based on carbon nanotubes.	ES001468
2008*	A. Marco R. Villoria	A. Marco R. Villoria	Nanoreinforcement prepreg method and product thus obtained.	ES001515

CONCLUSÃO

Pelo descrito acima conclui-se que, nas últimas duas décadas, tem-se registado um aumento progressivo da investigação relacionada com nanotubos de carbono ao nível mundial. Esta tendência é seguida por Espanha, mas não se reflecte ainda no nosso país. De facto, Portugal apresenta níveis incipientes de produção de trabalho científico em CNTs até ao presente.

No que respeita a propriedade intelectual, e em particular o registo de patentes, a situação mundial parece seguir a produção de literatura científica. Nos registos encontra-se uma forte predominância de companhias

asiáticas, o que concorre com o domínio deste continente na produção de ciência relacionada com estas nanoestruturas. Finalmente, o registo de patentes na Península Ibérica afigura-se mínimo, sendo mesmo nulo em Portugal.

Não é do âmbito deste estudo investigar os factores que contribuíram para este desfasamento de Portugal com o resto do mundo, mas seria porventura de interesse verificar se esta situação se estende a outros campos da Ciência.

REFERÊNCIAS

- [1] S. Iijima, *Nature* **354** (1991) 56.
- [2] M. Monthieux, V. Kuznetsov, *Carbon* **44** (2006) 1621.
- [3] P. J. F. Harris, *Carbon Nanotube Science - Synthesis, properties and applications*, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [4] P. M. F. J. Costa, M. L. H. Green, *Química* **88** (2003) 57.
- [5] ISI Web of Knowledge (Thomson Reuters), acessível em: www.isiknowledge.com/
- [6] Free Patents Online (freepatentsonline.com), acessível em: <http://www.freepatentsonline.com/>
- [7] A. Jorio, M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, eds., *Carbon Nanotubes: Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*, Springer, Heidelberg, 2007.
- [8] P. M. Ajayan, S. Iijima, *Nature* **358** (1992) 23.
- [9] H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien, R. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **318** (1985) 162.
- [10] R. H. Baughman, A. A. Zakhidov, W. A. de Heer, *Science* **297** (2002) 787.
- [11] P. Serp, J. L. Figueiredo, *Carbon* **34** (1996) 1452.

ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

JOYSTICK CELULAR

Os cientistas sabem desde há décadas que as proteínas podem ser acetiladas em resíduos de lisina, mas esta modificação sempre foi vista como o parente pobre da fosforilação, que pode activar ou desactivar inúmeros processos em células vivas. No entanto, um novo estudo revela que a acetilação funciona também como um interruptor para um conjunto de funções celulares em organismos tão diversos como bactérias e humanos.

A acetilação é provavelmente mais conhecida pelo papel que desempenha no controlo dos genes de uma célula que são armazenados e que são sujeitos a transcrição. As primeiras pistas da sua versatilidade foram for-

necidas no ano passado, quando uma equipa de investigadores, incluindo Churaram Choudhary, um bioquímico da Universidade de Copenhaga, descobriu que centenas de proteínas são acetiladas, incluindo algumas envolvidas na divisão celular e na reparação de ADN. Mais recentemente, Guo-Ping Zhao da Universidade de Fudan, Xangai, e Kun-Liang Guan, presentemente na Universidade da Califórnia, San Diego, revelaram que a acetilação controla a glicólise, os ciclos do ácido tricarbóxico e da ureia e os metabolismos dos ácidos gordos e do glicogénio (*Science* **327** (2010) 1000 e 1004). "Estes são os mecanismos fundamentais numa célula, como a célula obtém a sua energia", refere Choudhary. "A acetilação é uma forma muito elegante e precisa para as cé-

lulas responderem e se adaptarem à energia que têm disponível", explica Zhao. Por exemplo, a equipa de investigadores descobriu que a acetilação permite às bactérias escolherem entre os mecanismos da glucose e do citrato, e às células do fígado humano escolherem entre os mecanismos da glucose e dos aminoácidos. A acetilação surge assim como um rival da fosforilação, pelo que é de todo pertinente descobrir como é que estes dois interruptores de controlo celular podem ser aproveitados em conjunto no desenvolvimento de fármacos com estas funcionalidades.

(Adaptado de *Chemical & Engineering News* **88** (8) (2010) 11)

Helder Gomes

A NOVA FACETA DA RESISTÊNCIA AOS ANTIBIÓTICOS

Quando os médicos receitam um antibiótico insistem com os pacientes para que o tomem na sua totalidade, de modo a prevenir a resistência ao fármaco que as bactérias conseguem desenvolver quando a dose é demasiado fraca.

Um novo estudo mostra agora que a administração inadequada de doses de um determinado antibiótico potencia a resistência, não só a esse antibiótico, mas também a outros antibióticos.

O estudo salienta a ocorrência de danos no ADN e de propensão de erros na sua reparação, como as causas.

O trabalho pode ajudar os cientistas a desenvolverem novas estratégias para combater o problema crescente da resistência aos antibióticos. O número de bactérias resistentes aos antibióticos tem crescido na última década.

O professor de engenharia biomédica James J. Collins e colaboradores da Universidade de Boston descobriram que a resistência pode ser desenvolvida quando radicais oxidantes (como

o radical hidroxilo) gerados pela administração do fármaco danificam o ADN da bactéria. Embora o sistema de reparação do ADN frequentemente repare o dano no ADN, esta reparação é propensa a erros e pode gerar mutações aleatórias que afectam a resistência das bactérias (*Mol. Cell*, doi: 10.1016/j.molcel.2010.01.003).

A resistência pode ser desenvolvida não só ao agente administrado, mas também a outros agentes não administrados, podendo inclusive dar-se a situação em que a resistência é desenvolvida a agentes não administrados e não ao próprio agente administrado.

Por exemplo, uma dose fraca de ampicilina pode potenciar a mutação da bactéria tornando-a resistente a um grande número de antibióticos, mas não à ampicilina. Os estudos de resistência a doses fracas de antibióticos têm incidido geralmente sobre a resistência aos agentes administrados e não a outros agentes não administrados.

As nova descoberta alerta para a necessidade de regular de uma forma mais apertada o uso de antibióticos, principalmente para sensibilizar os médicos a serem mais disciplinados na sua prescrição de antibióticos e os pacientes a serem mais disciplinados no cumprimento das suas prescrições. A co-administração de inibidores de sistemas de reparação de ADN

(para prevenir os erros de reparação de ADN que causam mutações) pode ajudar a resolver este problema, refere Collins.

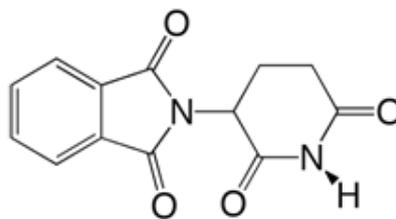
(Adaptado de *Chemical & Engineering News* **88(8)** (2010) 10)

Helder Gomes

ESCLARECIMENTO DOS EFEITOS TRÁGICOS DA TALIDOMIDA

A talidomida foi usada para combater a lepra. Como consequência do seu uso, foram contabilizados nos anos de 1950 e 1960 cerca de 10000 a 20000 recém-nascidos com várias deficiências, em particular ao nível de mal-formações dos membros.

A explicação molecular para os efeitos da talidomida, enquanto fármaco de combate da lepra ou como sedativo e, sobretudo, o seu efeito no desenvolvimento dos membros dos fetos humanos, permanece, no entanto, por esclarecer. Os efeitos da talidomida são difíceis de estudar, dado que no organismo ambos os enantiómeros da talidomida são hidrolizados, hidroxilados e racemizados e estes percursos metabólicos variam em diferentes organismos. A talidomida afecta os fetos humanos e também provoca mal-formações em recém-nascidos de galinhas e peixes, mas não em ratos.



Talidomida

Tinham já sido publicados estudos que mostram que a talidomida bloqueia o desenvolvimento de vasos sanguíneos. Agora, uma equipa de investigadores japonesa identificou uma proteína humana que se liga à talidomida, designada por CRBN, e que faz parte de um complexo que degrada proteínas (*Science* **327** (2010) 1345). Esta equipa administrou talidomida a galinhas e peixes zebra que foram “modificados” para expressarem proteínas CRBN incapazes de se ligarem ao fármaco e verificaram que estes animais não exibiam mal-formações nos recém-nascidos tão severas como acontecia com animais de controle.

Este trabalho é considerado uma peça importante do puzzle da talidomida, podendo vir a contribuir para o esclarecimento dos seus efeitos. Contudo, há ainda muitas outras proteínas às quais a talidomida se pode ligar e que falta identificar, em particular aquelas envolvidas na acção terapêutica da talidomida.

(Adaptado de C&EN de 11 de Março)

JM

NOVO SUPERCONDUTOR ORGÂNICO

A supercondutividade caracteriza-se pela ausência de resistência eléctrica (não há efeito de Joule e, por isso, não podem ser usados como elementos de aquecimento eléctrico, podendo transportar corrente eléctrica sem perdas) e pelo seu diamagnetismo (repulsão dos campos magnéticos, sendo usado na levitação magnética).

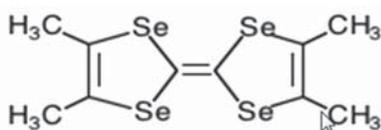


Levitação magnética de um íman acima de um supercondutor

Os materiais supercondutores são usados no fabrico de magnetos potentes, como os utilizados no LHC (*Large Hadron Collider*), o maior acelerador de partículas do mundo localizado no CERN, e que recentemente retomou o seu funcionamento. Contudo a estabilização deste estado supercondutor exige a utilização de temperaturas baixas. Daí que haja um intenso trabalho de investigação que procura estabilizá-lo a temperaturas elevadas, idealmente próximas da temperatura ambiente. Após a descoberta da supercondutividade no mercúrio, por Heike Kamerlingh Onnes, na sequência do seu sucesso em liquefazer o hélio, em 1908, o mesmo comportamento foi

descoberto noutros metais e ligas metálicas. A temperatura abaixo da qual se estabiliza o estado supercondutor designa-se por *temperatura crítica*, T_c . Além dos sistemas metálicos, a supercondutividade foi também descoberta em materiais cerâmicos (sendo nesta altura os materiais que exibem o valor mais alto de T_c , da ordem dos 120K), e também em sistemas de base orgânica. A supercondutividade em sistemas orgânicos foi inicialmente descoberta no sal $(TMTSF)_2PF_6$ (família de compostos conhecida como “sais de Bechgaard”), inicialmente com $T_c \approx 0,9$ K, sob pressão de 6500 bar, e o valor da temperatura crítica foi rapidamente aumentando até cerca de 12K à pres-

são atmosférica, por variações moleculares.



Molécula de tetrametil-tetrasselenafulvaleno, TMTSF



Molécula de fulereno C₆₀.

na supercondutor a 18 K (*Nature* **464** (2009) 76). Apesar do valor de T_c ser muito baixo, e comparável ao obtido para outros supercondutores orgânicos, esta descoberta pode levar à preparação de novos supercondutores.



Molécula de piceno

Um (e único) polímero supercondutor, (SN)_x, foi também identificado.

A supercondutividade foi também descoberta em fulereno dopado com metais alcalinos (como K₃C₆₀, T_c=18 K) e em grafite intercalada com cálcio (T_c=11 K).

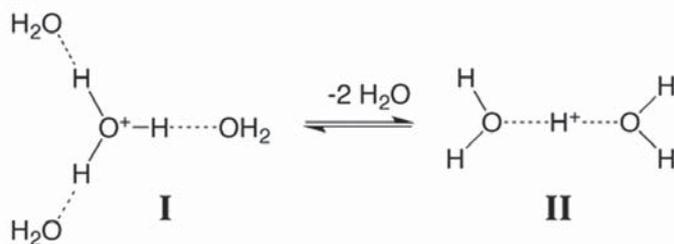
A última descoberta de um supercondutor de base orgânica foi feita por uma equipa japonesa, liderada por Yoshihiro Kubozono, prof. da Universidade de Okayama. O material em causa é o piceno, uma subunidade do grafeno, dopado com átomos de potássio ou de rubídeo, que se tor-

(Adaptado de C&EN de 8 de Março)

JM

ESTRUTURA DO IÃO HIDROGÉNIO EM ÁGUA (H_{aq}⁺)

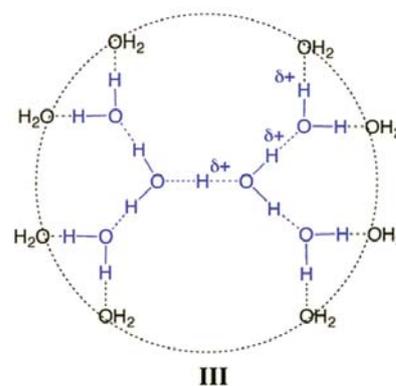
A descrição molecular correcta do ião hidrogénio H_{aq}⁺ em água, produzido pela dissociação de um ácido, tem sido uma das questões mais antigas em Química. Apesar de vulgarmente se considerar que a espécie formada é H₃O_{aq}⁺, considerando uma descrição mais genérica H(H₂O)_n⁺, o valor de n tem sido objecto de longo debate, não estando bem definido. Em particular, tem havido grande debate sobre a importância relativa das estruturas dos tipos Eigen, H₃O⁺•3H₂O (I), ou Zundel, H₅O₂⁺ (II):



Recentes estudos teóricos favorecem uma descrição cinética que esbata a distinção entre estas duas estruturas estáticas. O mínimo de energia foi calculado como correspondendo a uma estrutura do tipo Eigen (I), distorcida, em que uma das ligações de hidrogénio assimétricas O—H·····O (“par especial”) é mais curta que as outras duas.

Um grupo da Universidade da Califórnia em Riverside (*Journal of the American Chemical Society* **132** (2010) 1484), mostrou agora, com base num estudo de espectroscopia de infravermelho (IV) para soluções aquosas de ácidos fortes, que a descrição adequada de H_{aq}⁺ requer a sua escrita formal como um ião H(H₂O)₆⁺. O espectro de IV deste ião não corresponde a nenhum dos tipos de estrutura acima descritos (Eigen ou Zundel). Para explicar a diferença entre esta estrutura e a de Eigen distorcida H(H₂O)₄⁺ que é a mais favorável, segundo os estudos teóricos, os autores propõem que o encurtamento de uma das ligações

vibração de OH em relação às da água “pura”. É assim proposta a estrutura III para este catião, em que o círculo a tracejado que passa pelos átomos de O da camada de hidratação exterior define a extensão da deslocalização da carga positiva, consistente com a formulação H(H₂O)₆⁺:



JM

de hidrogénio O—H·····O em I para criar o “par especial” atrai mais duas moléculas de água da vizinhança exterior para junto do núcleo da estrutura de Eigen, convertendo-a num ião H(H₂O)₆⁺. A carga positiva do ião estende-se até aos átomos de oxigénio da camada de hidratação exterior, mas não de forma significativa que permita distinguir as frequências de

CÉLULAS SOLARES DE CORANTE OU CÉLULAS DE GRÄTZEL

Sobre a necessidade

O desenvolvimento das células solares está a ser promovido pela crescente preocupação de as reservas de petróleo poderem esgotar-se neste século e ainda sobre o impacto ambiental resultante do seu uso. É previsível que as necessidades energéticas do planeta dupliquem nos próximos 50 anos, pelo que se torna necessário desenvolver fontes de energia renovável que compensem o défice resultante da utilização dos combustíveis fósseis.

Entre as fontes possíveis, o Sol constitui uma das mais apelativas: a energia recebida pela Terra proveniente do Sol atinge 3×10^{24} joules por ano, ou seja, cerca de 10000 vezes mais do que o consumo actual pela população global. Assim, cobrindo cerca de 0,1% da superfície da Terra com células solares com eficiência de 10% seria suficiente para suprir as necessidades actuais. Contudo, conseguir aceder a este enorme reservatório de energia permanece um desafio enorme.

A figura 1 mostra o espectro solar.

A eficiência das células solares é determinada não só por parâmetros intrínsecos (eficiência dos processos de

absorção de fótons, eficiência de conversão em carga eléctrica e eficiência de recolha dessa carga) mas também pela gama de comprimentos de onda que conseguem absorver e converter em energia eléctrica. Note-se que a gama do visível (400-750nm) corresponde apenas a cerca de 490 W/m^2 , ou seja, cerca de metade da energia total recebida do Sol. Refira-se, por outro lado que, se toda a energia solar fosse convertida em energia eléctrica, a corrente máxima gerada (em circuito fechado) seria de $68,9 \text{ mA/cm}^2$.

Para otimizar a eficiência desta conversão energética, estão em desenvolvimento concentradores solares que, absorvendo uma gama mais larga de comprimentos de onda, convertem essa energia numa gama de comprimentos de onda mais estreita que se procura depois combinar com células solares que exibam máxima eficiência de conversão energética nessa região espectral.

Sobre as abordagens

As células fotovoltaicas usam o facto de a absorção de fótons na gama do ultravioleta e do visível provocar excitações electrónicas. Numa molécula, a transição electrónica de menor energia envolve a excitação de um electrão da HOMO (*highest occupied molecular orbital* ou orbital ocupada de mais alta energia) para a LUMO

(*lowest unoccupied molecular orbital* ou orbital vazia de menor energia).

O electrão promovido para a LUMO e o buraco que ficou na HOMO constituem um par electrão-buraco (de carga total nula). Num semiconductor inorgânico, este par descreve-se como uma carga negativa na banda de valência e uma carga positiva na banda de condução, com fraca ligação entre elas e podendo estar espacialmente afastadas.

Em sistemas moleculares, este par está mais fortemente ligado, estando as duas cargas muito próximas. Para conseguir separar estas duas cargas, recorre-se a junções de dois materiais.

A ciência das células solares tem sido dominada por dispositivos em que esta junção envolve semicondutores inorgânicos no estado sólido, habitualmente formas dopadas de silício amorfo ou cristalino e outros semicondutores compostos, tirando também partido da experiência e materiais disponibilizados pela indústria dos semicondutores.

Também os semicondutores orgânicos, quer moléculas de baixo peso molecular quer polímeros conjugados, têm estado a desenvolver-se.

As células orgânicas de polímero com maior eficiência (ca. 6% de conversão energética) são as baseadas no poli(hexiltiofeno), como doador electrónico, e em fulerenos (C_{60} , C_{70} e formas solúveis), como aceitadores electrónicos. Foi anteriormente referido (Química, vol 106, Jul/Set 2007) de forma sumária, o funcionamento das células fotovoltaicas de polímeros conjugados luminescentes combinados com fulerenos, funcionando o polímero como doador electrónico e o fulereno como aceitador.

Neste caso, após absorção de luz (primordialmente pelo polímero conjugado luminescente), dá-se, durante o tempo de vida do estado excitado (da ordem de nanosegundos), uma

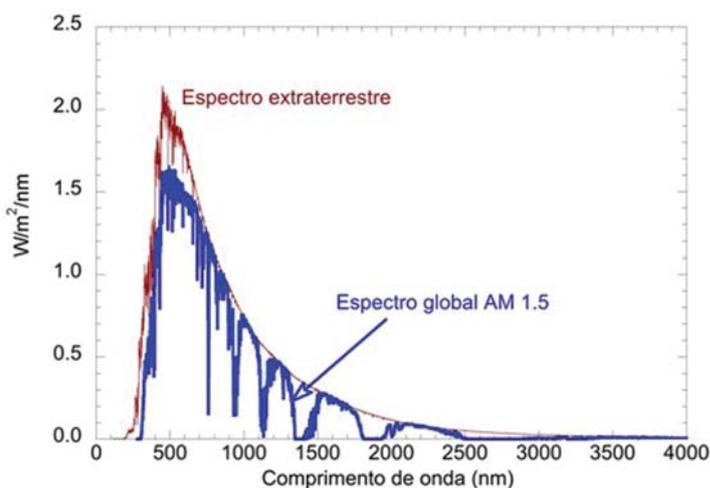


Figura 1 Espectro solar extraterrestre (densidade de energia total de 1366 W/m^2) e espectro global AM1.5, que corresponde ao espectro à superfície da terra (depois de atravessar a atmosfera) obtido quando o sol incide a 48° em relação ao zénite (a densidade de energia total é de 1000 W/m^2)

transferência de carga entre os dois componentes que, ao serem separadas (carga positiva ou buraco no polímero conjugado e electrão no fullereno) para cada um dos eléctrodos podem ser usadas para realizar trabalho eléctrico (accionando dispositivos eléctricos).

Contudo, é também possível usar não uma junção sólida, mas uma junção sólido-líquido, em que a fase sólida é constituída por um semiconductor e a fase líquida é um electrólito, obtendo-se uma célula fotoelectroquímica [1]. O electrólito pode ainda apresentar-se sob a forma de um gel ou como um electrólito sólido.

Sobre as células de corante (DSCs)

As células fotovoltaicas sensibilizadas com corante (*Dye Sensitized Solar Cells*, DSCs) foram inventadas por Michael Grätzel em 1991.

No essencial combinam elementos activos orgânicos e inorgânicos e são, a par das células fotovoltaicas orgânicas (de polímero ou com base em moléculas de baixo peso molecular), a alternativa às células fotovoltaicas inorgânicas (com base em silício e outros semicondutores inorgânicos elementares ou compostos).

Para se conseguir a absorção de energia e a separação de carga, há uma associação de um sensibilizador, como material absorvedor de fotões, com um semiconductor de hiato grande com morfologia mesoporosa ou nanocristalina. O sensibilizador, fonicamente excitado, transfere o electrão promovido à sua LUMO para a banda de condução do óxido semiconductor. O buraco que fica na HOMO é depois transferido para o cátodo (usualmente de platina), sendo este transporte mediado por um par redox dissolvido num electrólito que põe em contacto as nanopartículas do óxido e o cátodo. Este transporte de buracos pode, em alternativa, ser descrito como um transporte de electrões do cátodo para a HOMO do corante semi-ocupada, mediado pelo par redox referido. Desta forma recupera-se o corante no estado fundamental e disponível para sofrer nova excitação.

Sobre o funcionamento das DSCs

O princípio de operação de uma DSC resume-se na figura 2. No centro destas células está um filme mesoscópico de um óxido semiconductor que é colocado em contacto com um electrólito contendo um par redox ou em contacto com um condutor de buracos.

a maximizar a absorção de fotões. A fotoexcitação deste corante resulta na injeção de um electrão na banda de condução (BC) do óxido. O corante é regenerado através da doação de um electrão pelo electrólito (habitualmente um líquido orgânico contendo um sistema redox, como o par iodeto/tri-iodeto).

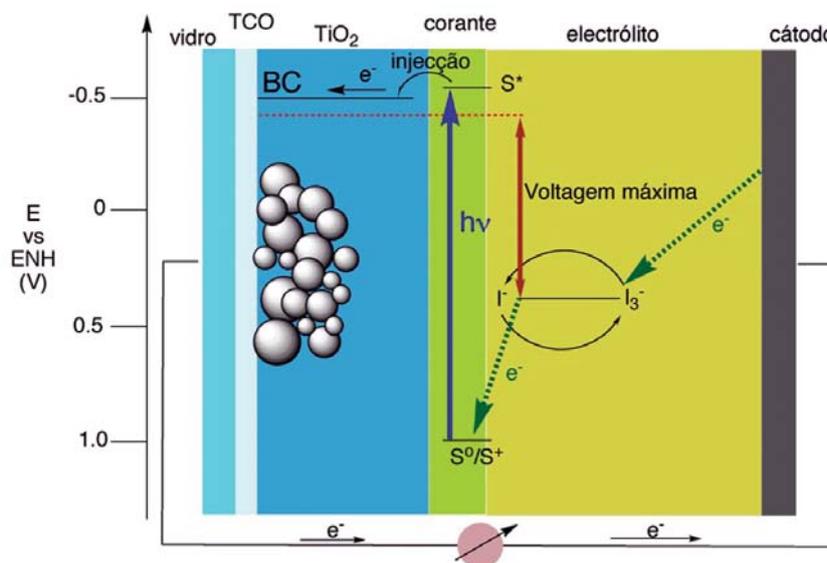


Figura 2 Esquema de funcionamento de uma DSC (adaptado de [2,3]) evidenciando a excitação electrónica do corante, a transferência electrónica do estado excitado para a banda de condução (BC) do TiO_2 e a transferência electrónica do mediador (I), que se oxida a I_3^- ; para o corante, com a recuperação da forma reduzida por redução do I_3^- no cátodo. A difusão do I_3^- para o cátodo contribui para o controle cinético do funcionamento da DSC. TCO designa um óxido condutor transparente (como ITO-indium-tin oxide, ou FTO-fluorinated tin oxide). São apresentados os potenciais em relação ao eléctrodo normal de hidrogénio (ENH)

O óxido semiconductor mais usado é o TiO_2 (anatase), com um hiato de 3,2 eV, embora outros óxidos de grande hiato, como ZnO e Nb_2O_5 , tenham também sido estudados. Tendo um hiato elevado, significa que estes óxidos absorvem essencialmente na região do ultravioleta.

Os filmes de óxidos mesoporosos são constituídos por empacotamento de pequenos cristais com alguns nanómetros de dimensão. Estes cristais estão interligados, permitindo a condução electrónica. São habitualmente preparados por técnicas de sol-gel ou depositados por outras técnicas, havendo um passo final de recozimento acima de 400 °C.

À superfície do filme nanocristalino de óxido encontra-se ligada uma monocamada de um corante sensibilizador, desenhado para absorver radiação a comprimentos de onda aos quais os óxidos são transparentes, de modo

A regeneração do corante pelo iodeto impede a recaptura do electrão, que se encontra na banda de condução, pelo corante oxidado. Por sua vez, o iodeto é regenerado pela redução de tri-iodeto no contra-eléctrodo, sendo o circuito fechado através da migração de electrões no circuito externo.

A tensão gerada sob iluminação corresponde à diferença entre o nível de Fermi do electrão no sólido e o potencial redox do electrólito.

Este dispositivo gera assim energia eléctrica a partir de energia solar sem sofrer nenhuma transformação química permanente.

No primeiro dispositivo preparado no laboratório foi usada uma folha de titânio recoberta com um filme fractal de TiO_2 de elevada área superficial produzido por sol-gel. A superfície foi derivatizada com um corante amarelo de ruténio, RuL_3 ($\text{L}=2,2'$ -bipiridil-4,4-

-dicarboxilato). Como contra-eléctrodo foi usado um fio de platina. O copo contendo estes dois componentes foi enchido com uma solução aquosa de electrólito, ligeiramente acidificada, contendo brometo e uma pequena quantidade de bromo. A tensão de circuito aberto conseguida por iluminação com uma lâmpada de halogéneo foi de 1V. A eficiência de conversão energética, quando exposta à luz solar, era de 1 a 2%.

O transporte electrónico através da banda de condução do filme de óxido mesoscópico está acoplado com reacções de transferência electrónica e com a difusão iónica através do electrólito.

Em particular, o movimento de electrões na banda de condução do filme de óxido semiconductor é acompanhado pela difusão de cations na camada de electrólito junto à superfície das nanopartículas, para compensar a carga.

Sobre a captura de luz pelos filmes de óxido mesoporosos derivatizados com corante

A absorção de luz por uma monocamada de corante é muito pequena, pelo que para se obter uma significativa eficiência fotovoltaica não se pode usar uma superfície plana de semiconductor. Daí a utilização de filmes porosos e nanoestruturados, com elevada área superficial. O filme nanoestruturado tem também que servir como condutor electrónico.

O sensibilizador, electronicamente excitado, transfere um electrão para a BC do óxido semiconductor de hiato elevado. Os electrões têm depois que se movimentar rapidamente através dos caminhos de percolação da camada de TiO_2 .

Um dos requisitos para a implementação real destes dispositivos é um longo tempo de vida, sem perda de performance. Muito trabalho tem sido dedicado ao desenvolvimento de compostos de ruténio, que são conhecidos pela sua excelente estabilidade.

Na figura 3 mostram-se as estruturas de alguns destes compostos.

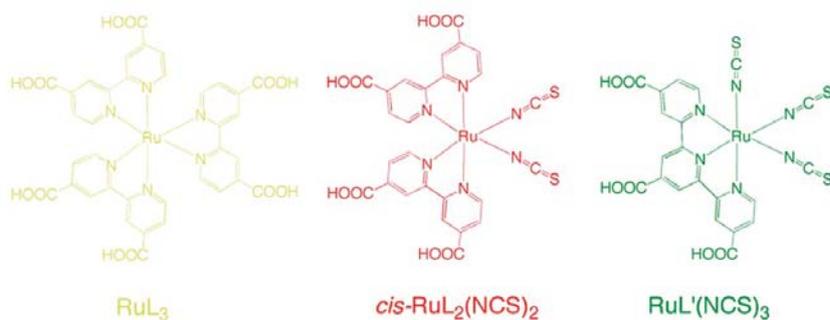


Figura 3 Estrutura de alguns complexos de ruténio usados como sensibilizadores em DSCs (L=ácido 2,2'-bipiridil-4,4'-dicarboxílico, L'=ácido 2,2',2''-terpiridil-4,4',4''-tricarboxílico)

Os filmes constituídos por nanopartículas de óxido constituem uma abordagem simples e muito poderosa para conseguir uma absorção eficiente de luz pela monocamada de moléculas de corante adsorvidas à superfície. Outras abordagens para aumentar a eficiência de captura de fotões incluem a localização de luz e a utilização de efeitos de hiato fotónico.

Para conseguir uma elevada eficiência de conversão energética, os corantes devem possuir grupos de ancoramento à superfície do óxido, como carboxilatos, hidroxamatos ou fosfonatos. Estes grupos deve ainda promover um forte acoplamento electrónico entre a LUMO dos corantes e a BC do semiconductor.

Pontos quânticos (*quantum dots*, QDs) podem substituir os corantes como unidades de captura dos fotões em DSCs. A absorção de luz cria excitações ou pares electrão-buraco nos QDs. O electrão é depois injectado na BC do óxido semiconductor enquanto que o buraco é transferido para um condutor de buracos ou para um electrólito presente nos poros do filme de óxido nanocristalino. Foi já demonstrada uma eficiente e rápida injeção de buracos de QDs de PbS para triarilaminas, que são materiais condutores de buracos. Os QDs podem efectuar a captura de fotões de forma mais eficiente do que os corantes mas ocupam uma área superior, reduzindo por isso a sua concentração comparativa.

Sobre o electrólito

Além dos electrólitos líquidos, têm sido estudados géis e electrólitos poliméricos. A utilização de líquidos implica um cuidadoso trabalho de selagem

da célula para evitar a fuga do líquido, o que se procura evitar recorrendo a electrólitos sólidos.

Os electrólitos poliméricos são constituídos por misturas de um polímero com um sal iónico. Pretende-se maximizar a condutividade eléctrica por iões, mantendo a condutividade electrónica a valores desprezáveis.

O polímero, possuidor de átomos com pares electrónicos isolados (N e O, por exemplo), funciona como solvente sólido, solvatando os cations de um sal, promovendo a sua dissociação. O poli(óxido de etileno), PEO, $(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_n$, tem sido dos mais usados, pois possui baixa temperatura de transição vítrea, T_g , de cerca de -50°C , sendo contudo um polímero com elevada percentagem de cristalinidade (tipicamente da ordem de 80%), a que corresponde uma temperatura de fusão de $\sim 65^\circ\text{C}$.

Este aspecto é relevante pois a migração iónica está associada a movimentação molecular de segmentos de PEO, estando por isso limitada aos domínios amorfos. A coordenação dos cations pelos átomos de O da cadeia conduz, por outro lado, a um aumento de T_g .

Para contrariar este efeito procede-se à adição de plastificantes. A utilização de misturas de polímeros e de copolímeros tem também sido explorada. A utilização destes electrólitos em DSCs tem a grande limitação de conduzir a uma fraca penetração na região livre dos filmes nanoporosos dos óxidos semicondutores, limitando a performance das DSCs. A utilização de várias técnicas de deposição tem no entanto permitido resultados interes-

santes com estes sistemas.

Sobre as estruturas mais recentes

O corante mais usado tem sido o *cis*-Ru(NCS)₂L₂ (L=2,2'-bipiridilo-4,4'-dicarboxilato), designado abreviadamente por N3. O sistema redox mais usado para regenerar o corante e transportar as cargas positivas para o contra-eléctrodo tem sido o par iodo/tri-iodeto dissolvido num electrólito orgânico ou num líquido iónico.

Por iluminação com luz solar total (*AM 1.5 global*, intensidade de 1000W/cm²) têm sido obtidos valores de fotocorrente em circuito fechado de 16 a 22mA/cm² e tensões em circuito aberto de 0.7-0.86V. Valores de eficiência de conversão energética da ordem de 11% foram já obtidos. Um teste de tempo de vida por exposição contínua a luz de intensidade total durante 12000h foi recentemente efectuado,

que confirmou que este sistema não sofre de qualquer instabilidade inerente, ao contrário do que acontece com o silício amorfo que sofre fotodegradação.

Perspectivas

A performance fotovoltaica das DSCs depende do posicionamento relativo dos níveis energéticos e da cinética dos processos de transferência electrónica nas interfaces. De forma a melhorar a eficiência e facilitar a aplicação das DSCs, os desafios que se apresentam são a optimização conjunta dos diversos componentes e o desenvolvimento de novas técnicas para melhorar o controle da cinéticas dos processos de transferência de carga nas interfaces.

Refira-se que as DSCs têm suscitado interesse industrial, tendo sido já produzidas telhas para testes de campo.

REFERÊNCIAS

- [1] M. Grätzel, *Nature* **414** (2001) 338-344.
- [2] M. Grätzel, *Inorganic Chemistry* **44** (2005) 6841-6851.
- [3] B. O'Regan e M. Grätzel, *Nature* **353** (1991) 737-740.
- [4] Y. Luo, D. Li e Q. Meng, *Advanced Materials* **21**(2009) 4647-4651.
- [5] J. N. de Freitas, A. F. Nogueira e M.-A. de Paoli, *Journal of Materials Chemistry* **19** (2009) 5279-5294.

Jorge Morgado

UM TRICICLO AROMÁTICO ISÓMERO DO HEXASILABENZENO

O benzeno é o protótipo dos compostos aromáticos, estabelecendo a base da famosa regra associada a Hückel de que a presença de 4n+2 electrões deslocalizados em ciclo identifica a aromaticidade e a estabilização associada.

A perspectiva de conseguir compostos aromáticos à base de silício (pertencente ao mesmo grupo da Tabela Periódica que o carbono) foi ignorada durante muito tempo dado que o silício tem sido considerado genericamente incapaz de formar ligações π estáveis. Contudo, desde 1981 que se obtiveram vários compostos de silício em que este forma ligações duplas ou triplas.

Tal resulta da estabilização electrónica ou estereoquímica (por exemplo usando substituintes volumosos como o mesitilo (2,4,6-trimetilfenilo)).

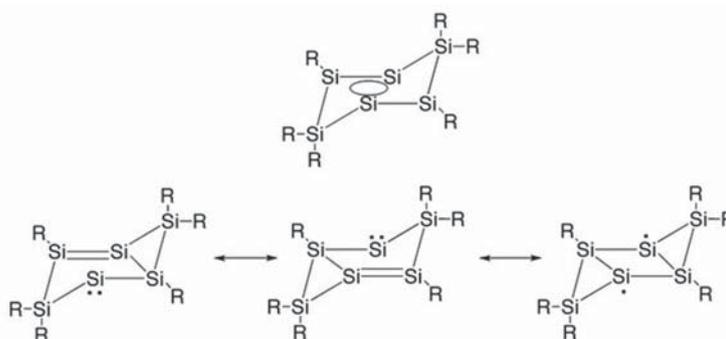
Em particular, foram preparados sila- e 1,2-disilabenzenos planares e com estruturas do tipo Hückel. A obtenção de sistemas aromáticos baseados apenas em silício tem sido mais difícil e, em particular, o hexasilabenzeno (Si₆H₆), não foi ainda preparado.

Recentemente (*Science* **327** (2010) 564) um grupo do *Imperial College London* conseguiu preparar e isolar cristais de Si₆R₆ (em que R=2,4,6-

-triisopropilfenil), um isómero dismutal do hexasilabenzeno, com carácter aromático.

A estrutura, determinada por difracção de raios X, confirmou a conformação em cadeira prevista teoricamente para o hexasilabenzeno.

JM



Chemistry & Sustainability, Energy & Materials

To view the latest articles below, simply visit
www.chemsuschem.org

Communications:

**ε-Caprolactamium Hydrogen Sulfate:
An Ionic Liquid Used for Decades in the
Large-Scale Production of ε-Caprolactam**
I. T. Horváth et al.

**Highly Active Catalysts for the
Telomerization of Crude Glycerol with
1,3-Butadiene**
B. M. Weckhuysen et al.

**Synthesis of Dimethyl Carbonate from
Carbon Dioxide Catalyzed by Titanium
Alkoxides with Polyether-type Ligands**
T. Sakakura et al.

**A Versatile Iridium Catalyst for Aldehyde
Reduction in Water**
J. Xiao et al.

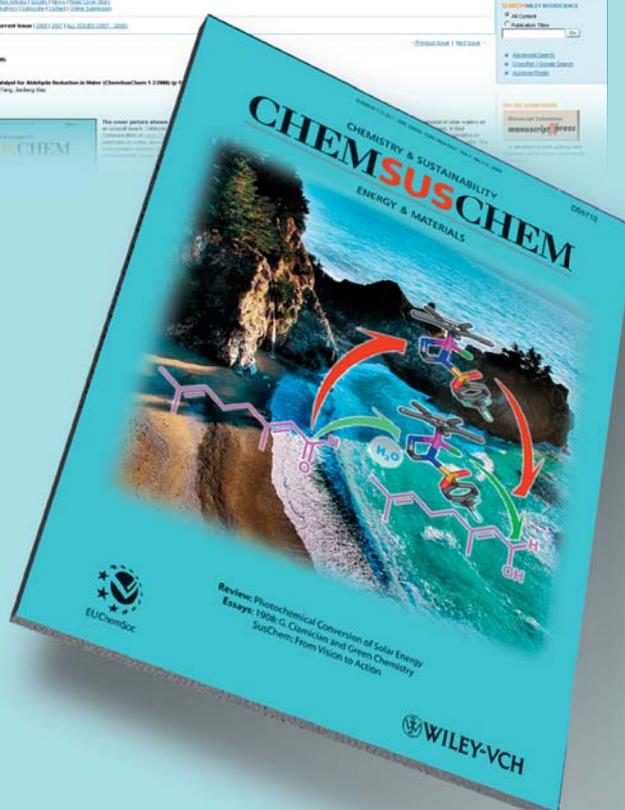
Full Papers:

**Surfactants from Biomass: A Two-Step
Cascade Reaction for the Synthesis of Sorbitol
Fatty Acid Esters Using Solid Acid Catalysts**
A. Corma et al.

**Regiodivergent Baeyer–Villiger Oxidation of
Fused Ketones by Recombinant Whole-Cell
Biocatalysts**
M. D. Mihovilovic et al.

**A Highly Active Aqueous Olefin Metathesis
Catalyst Bearing a Quaternary Ammonium Group**
K. Grela et al.

**On the Energy Efficiency of Microwave-Assisted
Organic Reactions**
C. O. Kappe et al.



Review:

Photochemical Conversion of Solar Energy
V. Balzani et al.

Founding Societies:

Società Chimica
Italiana (SCI)



Gesellschaft
Deutscher
Chemiker (GDCh)



ChemSusChem
is co-owned by

Editorial Union
of Chemical Societies



and supported by

Asian Chemical
Editorial Society



Subscribe now!

Institutions can opt to receive Complimentary Online Access
to *ChemSusChem* throughout 2008.
Register here

www.interscience.wiley.com/newjournals

cs-journals@wiley.com (North and South America)
service@wiley-vch.de (Germany/Austria/Switzerland)
cs-journals@wiley.co.uk (All other areas)

GFSM 2010 - L'EFFET MÖSSBAUER AU COEUR DES APPLICATIONS

20-21 MAIO 2010 EM LISBOA



O “Groupe Francophone de Spectroscopie Mössbauer” (GFSM) é um grupo de investigadores maioritariamente de origem francesa e belga que utiliza a espectroscopia Mössbauer como técnica primordial de investigação científica nas áreas da Física, Química, Bioquímica, Biofísica, Ciência dos Materiais e Património Cultural.

Desde 1979 que esta associação organiza anualmente umas jornadas científicas com o objectivo de favorecer a partilha de resultados de investigação, de desenvolvimentos da técnica e sua aplicação a novas temáticas e, ainda, como incentivo à participação de jovens investigadores em período de formação (alunos de doutoramento).

Este ano, o encontro “GFSM 2010 - L'effet Mössbauer au coeur des applications” terá lugar nos dias 20 e 21 de Maio e realizar-se-á extraordinariamente em Portugal, na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, no Campo Grande.

A realização deste encontro em Lisboa constitui uma oportunidade para reforçar colaborações e estabelecer novos projectos com grupos de investigação francófonos, sendo, simultaneamente, uma boa ocasião para conhecer directamente a própria comunidade de mossbaueristas portugueses.

E: info@gfsm2010.com URL: www.gfsm2010.com

7TH ANQUE'S INTERNATIONAL CONGRESS

13-16 JUNHO 2010 EM OVIEDO, ESPANHA



A água é um bem essencial a todas as formas de vida conhecidas. Um dos desafios mais importantes do século XXI é assegurar a gestão sustentável deste recurso vital. Sem dúvida, a química e a tecnologia química desempenharão um papel importante na apresentação de ideias e de soluções que permitam responder com sucesso a este desafio.

O problema da escassez de água é um factor crítico e, consciente da importância crescente deste problema e do papel que a química pode representar na sua resolução, a Associação Nacional de Químicos de Espanha (ANQUE) decidiu organizar o seu 7º Congresso Internacional sob a temática “O Ciclo da Água. Presente e Futuro”, a realizar em Oviedo, Espanha, entre 13 e 16 de Junho de 2010.

Os investigadores, os utilizadores e os gestores envolvidos na várias etapas do ciclo da água, começam a olhar cada vez mais para este recurso de uma forma integrada, considerando o problema de uma forma global. No futuro, a captação de água não será mais considerada como uma etapa separada dos tratamentos de água para consumo humano ou para outros fins, uma vez que esta etapa deverá ser a primeira etapa de um outro ciclo. Assim, o conceito de reutilização da água foi ampliado. Se a água for suficientemente tratada de modo a tornar-se água reutilizável, então essa água regressa ao ponto inicial do ciclo.

Este congresso pretende ser um fórum para a discussão e troca de informação entre empresas, instituições públicas, centros de investigação e universidades, no qual serão apresentados os avanços científicos e tecnológicos mais recentes relacionados com a gestão sustentada dos recursos hídricos no ciclo integral da água.

E: congresssecretary@anque2010.org URL: www.anque2010.org

4TH INTERNATIONAL WORKSHOP ON PRACTICAL APPLICATIONS OF COMPUTATIONAL BIOLOGY & BIOINFORMATICS (IWPACBB '2010)
16-18 JUNHO 2010 EM GUIMARÃES

O sucesso recente da Bioinformática tem sido promovido pela investigação nas áreas da Biologia Molecular e da Medicina Molecular em iniciativas como o projecto do Genoma Humano. Estas iniciativas conduziram a um aumento exponencial do volume e diversificação de dados, incluindo sequências e anotações em nucleotídeos e proteínas e literatura biomédica, entre muitos outros. A Biologia de Sistemas é uma área de investigação relacionada que tem vindo a substituir a visão redutora que dominou a investigação na área da Biologia nas últimas décadas, exigindo os esforços coordenados dos biólogos e dos investigadores relacionados com a análise de dados, modelação matemática, simulação computacional e optimização.

A acumulação e exploração de bases de dados massivas promove o desenvolvimento de nova tecnologia computacional e a investigação destes assuntos. Neste contexto, muitos dos modelos computacionais e ferramentas usadas pelos biólogos com grande sucesso nessas iniciativas, como métodos de classificação para dados de expressão genética, são baseados em técnicas de Ciência Computacional/Inteligência Artificial (CS/AI). De facto, estes métodos têm ajudado em tarefas relacionadas com a descoberta de conhecimento, tarefas de modelação e optimização, visando o desenvolvimento de modelos computacionais de modo a que a resposta de sistemas biológicos complexos a qualquer perturbação possa ser prevista.

O 4º Workshop Internacional sobre Aplicações Práticas da Biologia Computacional & Bioinformática (IWPACBB) pretende promover a interacção entre a comunidade científica para discutir aplicações da CS/AI com um carácter interdisciplinar, explorando as interacções entre subáreas da CS/AI, da Bioinformática, da Quimioinformática e da Biologia de Sistemas.

E: mrocha@di.uminho.pt URL: iwpacbb2010.di.uminho.pt



FOOD AND NUTRITION SIMULATION CONFERENCE – FOODSIM'2010
24-26 JUNHO 2010 EM BRAGANÇA

O congresso FOODSIM – The Food and Nutrition Simulation Conference realizou-se pela primeira vez em 2000, tendo sido criado por um grupo de professores e investigadores juntamente com o European Simulation Office, com o objectivo de se tornar num evento europeu de referência na área da simulação e desenvolvimento de modelos aplicados à qualidade e segurança alimentar, bem como à generalidade de processos da indústria agro-alimentar.

Na sequência dos 5 congressos bi-anuais europeus já realizados até à presente data, o Instituto Politécnico de Bragança em colaboração com o CIMO – Centro de Investigação de Montanha, terá o prazer de organizar e receber o congresso FOODSIM'2010, a decorrer nos dias 24 a 26 de Junho de 2010.

O programa científico encontra-se organizado segundo os seguintes temas principais: (i) Simulação em engenharia e processamento alimentar, (ii) Simulação em ciência e biotecnologia alimentar, (iii) Métodos e ferramentas aplicados na indústria alimentar e de bio-processos, (iv) Métodos e ferramentas aplicados à avaliação da qualidade e segurança alimentar, (v) Simulação aplicada ao desenvolvimento de alimentos funcionais, (vi) Simulação aplicada à gestão da produção alimentar, economia e rastreabilidade, (vii) Sustentabilidade na produção de alimentos e (viii) Inovação na produção de alimentos tradicionais. Para mais informações, consultar a respectiva página *web*.

E: cimo@ipb.pt URL: www.eurosis.org/cms/?q=node/1106



O 3º Congresso de Química da EuChEMS, a realizar em Nuremberga entre 29 de Agosto e 2 de Setembro de 2010 é organizado sob os auspícios da EuChEMS, Associação Europeia para as Ciências Químicas e Moleculares, que congrega 50 sociedades, incluindo a Sociedade Portuguesa de Química, representando um total de 150000 químicos. A Sociedade Alemã de Química é a sociedade acolhedora deste Congresso. À semelhança do sucesso das edições anteriores do Congresso, que se realizaram em Budapeste (2006) e em Torino (2008), a edição de 2010 irá permitir reunir cientistas da indústria, de instituições académicas e governamentais de toda a Europa e do mundo para discutir a investigação mais recente nas áreas nucleares da química e analisar o impacto da química na sociedade. Será dada ênfase particular aos grandes desafios

globais e às contribuições importantes que as ciências químicas fornecem para responder a esses desafios. O programa científico encontra-se organizado em sete tópicos principais, cada um compreendendo vários simpósios, e inclui não só lições plenárias e convidadas, mas também comunicações orais e sessões de posters. Está previsto ainda um espaço de exibição onde empresas de topo irão divulgar as suas inovações mais recentes na área da química e campos associados.

E: euchems-congress2010@gdch.de URL: www.euchems-congress2010.org

3rd EuChEMS Chemistry Congress

Chemistry – the Creative Force

29.08. – 02.09.2010 · NÜRNBERG · GERMANY

Topics
 Innovative Materials
 Resources and Environment
 Supramolecular Systems
 Catalysis
 Molecular Life Sciences
 Analysis, Manipulation and Simulation
 Advances in Organic and Inorganic Chemistry

Chairmen
 François Diederich
 Swiss Federal Institute of Technology Zurich/CH
 Andreas Hirsch
 University Erlangen-Nuremberg/D

www.euchems-congress2010.org

Contact: Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
 Congress Team
 P.O. Box 60 04 40
 60444 Frankfurt am Main - Germany
 Phone: +49 99 7917-368/-366
 E-mail: euchems-congress2010@gdch.de

CALL FOR PAPERS
SUBMIT YOUR ABSTRACT NOW
www.euchems-congress2010.org/abstracts.htm

CONFERÊNCIA TNT (TRENDS IN NANOTECHNOLOGY)
6-10 SETEMBRO 2010 EM BRAGA



A Conferência TNT (Trends in Nanotechnology) irá realizar-se entre 6 e 10 de Setembro de 2010 no Laboratório Ibérico de Nanotecnologia em Braga. O TNT é uma conferência que está na 11ª edição e como não poderia deixar de ser, Portugal foi o local escolhido para este ano. O objectivo passa por sublinhar a importância ao nível português e europeu da actividade da Nanociência e Nanotecnologia na região Norte de Portugal. Os eventos TNT têm demonstrado que são particularmente efectivos na transmissão de informação e, obviamente, ao nível da geração de redes de trabalho revelam-se extremamente eficazes. Estes encontros científicos de alto

nível apresentam o vasto leque de Investigação em Nanociência e Nanotecnologia, como também as políticas relacionadas e outro tipo de iniciativas.

Em 2009, o TNT – Trends in Nanotechnology teve lugar em Barcelona e contou com 447 participantes e 22 empresas/instituições. É objectivo do TNT 2010 incentivar a participação de empresas ibéricas, universidades e centros de investigação para estreitar laços no domínio da Nanotecnologia entre Portugal, Espanha e outros países.

E: tnt2010@tntconf.org URL: www.tntconf.org/2010/index.php?conf=10



XXXV REUNIÃO IBÉRICA DE ADSORÇÃO
8-10 SETEMBRO 2010 EM LISBOA

A XXXV Reunião Ibérica de Adsorção decorrerá em Portugal nos dias 8, 9 e 10 de Setembro de 2010, na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, organizada pelo grupo de Adsorção e Materiais Adsorventes. Como em Reuniões Ibéricas anteriores, este evento pretende ser um fórum de discussão de trabalhos relacionados com o tema multidisciplinar da adsorção. O programa científico inclui a participação do Professor Carlos Moreno-Castilla da Universidade de Granada, Espanha, que apresentará uma conferência no âmbito da caracterização da química de superfícies de carvões e sua implicação nos processos de adsorção, e do Professor Russell Morris da Escola de Química da Universidade de St. Andrews, Reino Unido, cuja conferência estará relacionada com o tema da adsorção e libertação controlada de NO a partir de sólidos porosos para aplicações terapêuticas.

Os sócios da Sociedade Portuguesa de Química beneficiam de uma redução na taxa de inscrição normal, podendo esta ser realizada sem penalização até ao dia 15 de Junho de 2010.

E: ria-lisboa@fc.ul.pt URL: ria2010.fc.ul.pt

3RD MATHEMATICAL METHODS IN ENGINEERING INTERNATIONAL SYMPOSIUM – MME'10
21-24 OUTUBRO 2010 EM COIMBRA



O 3º Simpósio Internacional sobre Métodos Matemáticos em Engenharia terá lugar em Coimbra, entre 21 e 24 de Outubro de 2010. O evento pretende ser um fórum internacional de discussão, onde ocorra troca efectiva de conhecimento e de experiência entre investigadores activos nas diversas áreas teóricas e aplicadas da Matemática na Engenharia. A participação de engenheiros e de cientistas da indústria é particularmente desejada e promovida. O programa irá ser organizado em sessões especiais, incluindo, entre outras, as seguintes: Biologia, Electroquímica, Conversão Energética, Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor.

Informações mais detalhadas sobre o evento poderão ser encontradas na página *web* do mesmo.

E: mme10@ipc.pt URL: mme10.ipc.pt

Secção compilada por Helder Gomes

20-21 Maio 2010 em Lisboa

GFSM 2010 - L'effet Mössbauer au Coeur des Applications
E: info@gfsm2010.com
URL: www.gfsm2010.com

6-11 Junho 2010 em Carvoeiro

8th International Symposium on Electrochemical Impedance Spectroscopy - EIS 2010
E: eis2010@eis2010.org
URL: www.eis2010.org

13-16 Junho 2010 em Oviedo, Espanha

7th ANQUE's International Congress
E: congresssecretary@anque2010.org
URL: www.anque2010.org

14-17 Junho 2010 em Lisboa

Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics - ECCOMAS CFD 2010
E: info@eccomas-cfd2010.org
URL: www.eccomas-cfd2010.org

16-18 Junho 2010 em Guimarães

4th International Workshop on Practical Applications of Computational Biology & Bioinformatics (IWPACBB '2010)
E: mrocha@di.uminho.pt
URL: iwpacbb2010.di.uminho.pt

20-25 Junho 2010 na Figueira da Foz

European Conference on X-Ray Spectrometry – EXRS 2010
E: exrs2010@fis.uc.pt
URL: exrs2010.fis.uc.pt

24-26 Junho 2010 em Bragança

Food and Nutrition Simulation Conference – FOODSIM'2010
E: cimo@ipb.pt
URL: www.eurosis.org/cms/?q=node/1106

28 Junho-2 Julho 2010 em Bolonha, Itália

EUChem Conference on Organic Free Radicals
E: chrys@isof.cnr.it
URL: www.isof.cnr.it/biofreeradicals/EuChem.html

11-16 Julho 2010 em Ferrara, Itália

XXIII IUPAC Symposium on Photochemistry
E: snf@unife.it
URL: www.unife.it/iupac-photochem-2010

11-16 Julho 2010 em Glasgow, Escócia

43rd International Symposium on Macromolecules - IUPAC World Polymer Congress 2010
E: pete.lovell@manchester.ac.uk
URL: www.Macro2010.org

25-30 Julho 2010 em Leoben, Áustria

14th International Symposium on Solubility Phenomena & Related Equilibrium Phenomena
E: heinz.gamsjaeger@mu-leoben.at
URL: issp.unileoben.ac.at

1-6 Agosto 2010 em Bergen, Noruega

18th International Conference on Organic Synthesis
E: leiv.sydnnes@kj.uib.no
URL: www.icos-18.no

15-19 Agosto 2010 em Ottawa, Canadá

3rd IUPAC Conference on Green Chemistry
E: jessop@chem.queensu.ca
URL: www.icgc2010.ca

29 Agosto-2 Setembro 2010 em Nuremberga, Alemanha

3rd EuCheMS Chemistry Congress
E: euchems-congress2010@gdch.de
URL: www.euchems-congress2010.org

29 Agosto-2 Setembro 2010 em Praga, República Checa

19th International Congress of Chemical and Process Engineering - CHISA 2010
7th European Congress of Chemical Engineering - ECCE-7
E: org@chisa.cz
URL: www.chisa.cz/2010

5-10 Setembro 2010 em Cón-Cón, Chile

XXII Congreso Ibero-americano de Catálise
E: cicat2010@udec.cl
URL: www.cicat2010.cl

6-10 Setembro 2010 em Braga

Conferência TNT (Trends in Nanotechnology)
E: tnt2010@tntconf.org
URL: www.tntconf.org/2010/index.php?conf=10

8-10 Setembro 2010 em Lisboa

XXXV Reunião Ibérica de Adsorção - RIA
E: ria-lisboa@fc.ul.pt
URL: ria2010.fc.ul.pt

8-10 Setembro 2010 no Porto

Fourth European Workshop on Optical Fibre Sensors - EWOFs'2010
E: ewofs@inescporto.pt
URL: www.ewofs.org

12-15 Outubro 2010 em Lisboa

XXI Encontro Nacional Tecnicelpa
VI Congresso Iberoamericano de Investigação em Celulose e Papel - CIADICYP 2010
E: tecnicelpa.ciadicyp@tecnicelpa.com
URL: tecnicelpa.com/ciadicyp/2010

21-24 Outubro 2010 em Coimbra

3rd Mathematical Methods in Engineering International Symposium – MME'10
E: mme10@ipc.pt
URL: mme10.ipc.pt

15-17 Dezembro 2010 no Porto

Congresso Nacional de Bioquímica
E: spb@imagem.ibili.uc.pt
URL: www.spb.pt

31 Agosto-3 Setembro 2011 em Budapeste, Hungria

4th European Conference on Chemistry for Life Sciences (4th ECCLS)
E: 4eccls@mke.org
URL: www.4eccls.mke.org.hu

11-15 Setembro 2011 em Belgrado, Sérvia

Euroanalysis XVI
E: nebojsa@congrexpo.co.rs
URL: www.euroanalysis2011.rs

Secção compilada por Helder Gomes