

boletim

SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE
QUIMICA



Publicação Trimestral • N.º 29 (Série II) • Setembro 1987

Aspectos históricos do empirismo racional.	9
A química dos tranquilizantes	20
A segurança no manuseamento dos produtos químicos	13
O conceito de energia de activação.....	17
A apresentação de resultados de investigação	23

SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



CORPOS GERENTES

Presidente — **M.A.V. Ribeiro da Silva**
 Vice-Presidente — **A.J. Campos Varandas**
 Secretário-Geral — **A. Romão Dias**
 Secretários-Geral Adjuntos
 — **Maria Cândida Vaz e Carlos N. Castro**
 Tesoureiro — **Edmundo G. Azevedo**

Conselho Fiscal

Presidente — **Virgílio Meira Soares**
 Vice-Presidente — **Luís Alcácer**
 Relator — **Margarida Salema**

Mesa da Assembleia Geral

Presidente — **Vitor Lobo**
 1.º Secretário — **Ferreira Gomes**
 2.º Secretário — **Luisa Abrantes**

ASSEMBLEIAS REGIONAIS

DELEGAÇÃO DO NORTE (Sede no Porto)

Assembleia Regional

Presidente — **João Cabral**
 1.º Secretário — **Raul Barroca**
 2.º Secretário — **José Luís C. Figueiredo**

Direcção da Delegação Regional

Presidente — **Manuel Ribeiro da Silva**
 Secretário — **Duarte Costa Pereira**
 Vogal — **Baltazar Romão de Castro**

DELEGAÇÃO DO CENTRO (Sede em Coimbra)

Assembleia Regional

Presidente — **A.J. Andrade de Gouveia**
 1.º Secretário — **F. Pinto Coelho**
 2.º Secretário — **Júlio A.M. Cunha Pinto**

Direcção da Delegação Regional

Presidente — **A.J. Campos Varandas**
 Secretário — **Carlos F.G. Gerales**
 Vogal — **Júlio P. de Jesus**

DELEGAÇÃO DO SUL (Sede em Lisboa)

Assembleia Regional

Presidente — **Ana Lobo**
 1.º Secretário — **Ramôa Ribeiro**
 2.º Secretário — **Fernando M.S. Fernandes**

Direcção da Delegação Regional

Presidente — **César A.N. Viana**
 Secretário — **Carlos J.R.C. Romão**
 Vogal — **Manuel Nunes da Ponte**

boletim

Propriedade e edição da Soc. Port. de Química

Director:

JOAQUIM J. MOURA RAMOS

Directores Adjuntos

MÁRIO N. BERBERAN E SANTOS
 PALMIRA DIAS
 BELARMINO A. SALVADO BARATA

Redacção e Administração

Sociedade Portuguesa de Química
 Av. da República, 37 - 4.º
 1000 LISBOA — Tel. 73 46 37

(Horário de expediente: de 2.ª a 6.ª-feira
 das 10 às 13 horas)

SECÇÕES TEMÁTICAS:

Informações, actualidade

Rita Delgado (IST)

Educação em Química e Ensino da Química

Vítor D. Teodoro (IPED)

Química e Indústria

José da Costa Reis (CNP)

Evolução Química

Hernâni Maia (Univ. Minho)

Segurança nos Laboratórios

Maria João Marcelo Curto (LNETI)

Química e Energia

Fernando Jorge Pina (UNL)

Química e Saúde

Eduarda Rosa (Fac. Farmácia Lisboa)

Computadores em Química

Fernando M.S.S. Fernandes (FCL)

História da Química em Portugal

A. Amorim Costa (Univ. Coimbra)

Congressos e Conferências

Maria Regina Tavares (LNETI)

Publicidade

MARIA MATILDE MARQUES
 Centro de Química Estrutural
 Complexo Interdisciplinar — IST
 Av. Rovisco Pais
 1096 LISBOA Codex — Tel. 57 26 16 — Ext. 266

Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores e as opiniões neles defendidas não envolvem as direcções do Boletim e da Sociedade Portuguesa de Química.

CONTRIBUTO DE ARTISTAS PARA «QUÍMICA E ARTE»

As obras de arte abaixo indicadas e reproduzidas na contracapa do n.º 28 deste boletim foram oferecidas pelos seus autores como apoio à edição desse número, especialmente dedicado às relações entre a Química e a Arte.

1 — João Cutileiro, <i>serigrafia, 16×24 cm, tiragem de 100 exemplares..</i>	8 000\$00
2 — Jorge Mealha, <i>cerâmica, diâmetro 47 cm (1987)</i>	15 000\$00
3 — João Cutileiro, <i>serigrafia, 16×24 cm, prova de artista.....</i>	8 000\$00
4 — Martha Telles, <i>A paciência, serigrafia, 20×33.5 cm, prova de artista.....</i>	15 000\$00
5 — José Augusto, <i>Espaço limitado, gravura sobre chapa de zinco a duas cores, técnica mista, 39×28 cm, prova de artista sem tiragem (1969).....</i>	12 000\$00
6 — Maria Gabriel, <i>Dois pássaros, xilogravura a quatro cores, 34.5×41 cm prova única (1985).....</i>	15 000\$00
7 — Rui Perdigão, <i>original em técnica mista, 21×30 cm</i>	30 000\$00

A entrega será feita pela maior oferta, havendo sorteio se mais de um proponente oferecer o valor máximo. O valor de base para cada obra é o indicado acima.

Os interessados deverão enviar para a Direcção do Boletim a sua proposta, preenchendo o formulário que se segue, apenas sendo válidas as propostas recebidas até ao dia 16 de Novembro de 1987.

Pretendo adquirir a obra n.º _____ de _____
_____ para o que ofereço a quantia de _____ \$00
como apoio à edição do Boletim da SPQ. Enviarei à SPQ esta quantia após ser informado de que a referida obra me foi atribuída. Em alternativa, e nas mesmas condições, candidato-me à aquisição da obra n.º _____ de _____
_____ pelo valor de _____ \$00.

NOME _____

MORADA _____

TELEFONE _____

PARA «QUÍMICA E ARTE» CONTRIBUTO DE ARTISTAS

As obras de arte apresentadas em molduras e reproduzidas em cartazes de 10 x 15 cm, podem ser enviadas para o endereço acima mencionado, com o nome do artista, especialmente dedicadas às relações entre a Química e a Arte.

- 1 — João Cutileiro, serigrafia, 10 x 14 cm, tiragem de 100 exemplares, 1982, 100000
- 2 — Jorge Mendes, serigrafia, tiragem de 45 em 1982, 100000
- 3 — João Cutileiro, serigrafia, 16 x 14 cm, tiragem de 100 exemplares, 100000
- 4 — Maria Teller, A Química, serigrafia, 10 x 15 cm, tiragem de 100 exemplares, 100000
- 5 — José Augusto, Espaço Químico, serigrafia, 10 x 15 cm, tiragem de 100 exemplares, 100000
- 6 — Maria Teller, Química, serigrafia, 10 x 15 cm, tiragem de 100 exemplares, 100000
- 7 — Rita Ferreira, original em técnica mista, 15 x 11 cm, tiragem de 100 exemplares, 100000

A cada obra enviada para este concurso, o participante deve enviar um cartão de identificação, com o nome do artista, o endereço e o valor máximo a ser pago por obra. O cartão de identificação deve ser enviado para o endereço do concurso, com o nome do participante e o valor máximo a ser pago por obra. O cartão de identificação deve ser enviado para o endereço do concurso, com o nome do participante e o valor máximo a ser pago por obra.

Prezado(a) Senhor(a) _____
 para o qual o presente cartão de identificação é enviado.
 Como apoio à edição do Boletim da SPQ, Lavaredo a SPQ está querendo publicar
 informações de que a revista obra me foi enviada. Por favor, enviar
 com este cartão-me a aquisição da obra n.º _____
 pelo valor de _____

NOME _____
 MORADA _____
 TELEFONE _____

SUMÁRIO

Informações, actualidade.....	2
Química, uma ciência experimental? Aspectos históricos do empirismo racional, <i>A.M. Amorim Costa</i>	9
A regra do octeto, <i>J. Féria Seita</i>	12
Segurança, <i>Maria João Marcelo Curto</i>	13
O novo léxico científico de <i>Florêncio Vesúvio</i>	15
Energia de activação? Qual?, <i>Lídia Albuquerque e Raquel Gonçalves</i>	17
Sedativos ansiolíticos (tranquilizantes), <i>Emília Barata de Carvalho</i>	20
Apresentação de resultados de investigação.....	23
O coeficiente de correlação, <i>Raquel Gonçalves e Ana Simões</i>	27
Os Livros.....	29
Congressos e conferências.....	31

Informações, actualidade *

Aos Sócios da SPQ

No número precedente deste Boletim o nosso Tesoureiro lançou um apelo a todos os sócios, apelo esse que, por razões de paginação, não teve o destaque que a sua importância exigiria. Aqui o reproduzimos nesta posição, certos de que todos os leitores o lerão e a ele responderão como se torna necessário para o regular funcionamento da nossa Sociedade:

Mais uma vez a situação económica da SPQ está num estado (super)crítico! Com dívidas que ascendem a várias centenas de contos (devidas, por exemplo, aos custos de produção do Boletim) torna-se imperioso encontrar financiamentos que permitam à SPQ assumir os seus compromissos.

Apelamos, por isso, a todos os sócios para que efectuem o pagamento das quotas em dívida.

Infelizmente ainda não está completada a informatização da SPQ, pelo que não é possível enviar a cada sócio informação daquilo que deve. Relembramos no entanto o valor das quotas:

1984 — 600\$00 (estudantes: 200\$00)

1985 — 600\$00 (estudantes: 200\$00)

1986 — 1500\$00 (estudantes: 500\$00)

1987 — 1500\$00 (estudantes: 500\$00)

Agradecemos que enviem (cheque, vale postal, etc.) as quantias em dívida com a máxima brevidade.

Edmundo J.S. Gomes de Azevedo
(Tesoureiro da SPQ)

Olimpíadas de Química

Em Santarém, no sábado 21 de Março de 1987, ocorreu uma invasão pacífica da Escola Secundária Sá da Bandeira, premeditada com a ajuda prestimosa de alunos e empregados da Escola e com a conivência de professores de Química e dos elementos do Conselho Directivo, que permaneceram na Escola durante todo o dia: realizava-se a Semi-Final (Zona Sul e Ilhas) da Olimpíada de Química. Trata-se de uma realização da Sociedade Portuguesa de Química que tem por objectivo estimular o interesse pela Química através da sã competição entre alunos do ensino secundário; simultaneamente procura-se criar uma oportunidade para alunos e professores encontrarem colegas de outras Escolas com quem possam trocar ideias, experiências, materiais.

Pessoalmente e por meio de cartazes fomos saudados de modo apropriado por alunos e professores e pudemos orientar-nos facilmente numa Escola que não conhecíamos. Ordem e desordem são conceitos relativos: o mobiliário das salas onde decorrem aulas durante todo o ano tinha uma disposição que não era

a habitual e poderia parecer desarrumada para algum elemento da Escola; mas para as actividades que aqui se realizaram o arranjo de mesas de trabalho e de cadeiras era adequado e proporcionou um ambiente acolhedor e propício às actividades dos alunos concorrentes. A projecção de um diaporama preparado por uma Professora da Escola mostrou locais históricos e belos de Santarém e deixou um convite para se voltar a esta cidade.

A equipa que elaborou e montou as provas foi constituída por professoras da Escola Secundária Sá da Bandeira e da Escola Secundária de Queluz, às quais se associaram mais alguns professores não só do ensino secundário como da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, tendo-se estabelecido um elo de ligação entre professores de níveis de ensino diferentes. Na concepção das provas esteve presente, desde o início, que se fizesse sentir que a Química está mesmo ao nosso lado. Prepararam-se provas laboratoriais e criativas em que as situações problemáticas propostas conduzissem ao repensar daquilo que os alunos conhecem de Química e lhes proporcionassem «investigações» que os levassem ao «descobrir» de conhecimentos que lhes foram ou lhes irão ser apresentados nas aulas de um modo talvez mais formal.

Deslocaram-se até à Escola alunos da Zona Sul e Ilhas. Do total de inscrições de 65 equipas de quatro elementos e um professor acompanhante, compareceram 15 do nível I (11.º ano de Quimicotecnia e/ou 12.º ano de Química), 17 do nível II (10.º ano de Quimicotecnia), 5 do nível III (10.º e/ou 11.º anos sem Quimicotecnia) e 19 do nível IV (8.º e/ou 9.º anos).

Enquanto os alunos «trabalhavam» nas provas, os professores acompanhantes foram convidados, de acordo com o regulamento, a trabalharem mais de perto nesta realização, vigiando e classificando provas. Alguns não acederam a esta solicitação; mas outros houve que a aceitaram de bom grado e, ao entregarem as provas relataram entusiasticamente aspectos relevantes das respostas dos alunos, nas quais transpareceu o modo como estes construíram as suas ideias a partir do ensino que lhes tinha sido ministrado.

A cada aluno, professor acompanhante e escola foi atribuído um certificado de presença. Às equipas classificadas nos três primeiros lugares foram atribuídos prémios, alguns dos quais ofertados por várias entidades. Estas equipas foram as seguintes:

* A elaboração desta rubrica contou com a colaboração de Ivo Antão, Margarida Costa Gomes, Jorge Magalhães, Agílio Pádua, Jorge Prates, Luís Paulo Rebelo e João Sottomayor.

Nível I (11.º ano de Quimicotecnia e/ou 12.º ano de Química)

- 1.º lugar — «Tecno-Pop» — Escola Secundária Sá da Bandeira, Santarém
- 2.º lugar — « 6×10^{23} » — Escola Secundária da Amadora
- 3.º lugar — «Orgânicos» — Escola Secundária Santa Maria do Olival, Tomar

Nível II (10.º ano de Quimicotecnia)

- 1.º lugar — «Eureka» — Escola Secundária D. Dinis, Lisboa
- 2.º lugar — «Os únicos» — Escola Secundária Sá da Bandeira, Santarém
- 3.º lugar — «Os aprendizes de feiticeiro» — Escola Secundária Pedro Nunes, Lisboa

Nível III (10.º e/ou 11.º anos sem Quimicotecnia)

- 1.º lugar — « V_2O_5 » — Escola Secundária Sá da Bandeira, Santarém
- 2.º lugar — «Electrões excitados» — Escola Secundária n.º 2 (Monte Gordo), Vila Franca de Xira
- 3.º lugar — «Os Daltons de Queluz» — Escola Secundária de Queluz

Nível IV (8.º e/ou 9.º anos)

- 1.º lugar — «Alquimistas» — Escola Secundária Camões, Lisboa
- 2.º lugar — «Os Lavoisiers» — Escola Secundária de Marvila, Santarém
- 3.º lugar — «Hidrogénios» — Escola Secundária de Benfica, Lisboa

Todos os alunos são cidadãos que, no futuro, serão chamados a ter uma opinião sobre aspectos em que a Química actua — mesmo que não venham a seguir cursos de Química. O importante na Olimpíada de Química é a aquisição de uma visão mais global da Química. A adesão a esta realização pode traduzir, por um lado, o impacto do fascínio da Química e, por outro lado, a dinâmica de Escolas Secundárias.

Nota: O regulamento e enunciados das provas podem ser obtidos na sede da SPQ.

Mariana P. Pereira
Departamento de Educação da Faculdade de Ciências
da Universidade de Lisboa

Jornadas galegas sobre tecnologias limpas

Para celebrar o Ano Europeu do Ambiente a Junta da Galiza e o Colégio de Químicos — ANQUE organizaram estas jornadas com o objectivo de levar à opinião pública uma visão real do impacto ambiental que podem produzir as instalações industriais na região galega. A ideia de fundo que se pretende transmitir é a de que o progresso científico e os sistemas de depuração devem compatibilizar o desenvolvimento industrial com a riqueza natural. Estas jornadas, que contam com a participação de especialistas de várias nacionalidades, terão a duração de dois dias a fixar durante o mês de Novembro próximo.

Serão abordados vários temas entre os quais:

- o fabrico de pesticidas: efluentes líquidos
- contaminantes orgânicos no meio ambiente
- resíduos sólidos urbanos e industriais
- centrais térmicas: efluentes gasosos

- a celulose e a indústria da madeira
- refinarias de petróleo: águas residuais

Para mais informações contactar:
Colégio Oficial de Químicos de Galicia
c/ Urzaiz 1, 2.º Derecha
36201 — VIGO
(Tel. 986-437915)

Integração Processual — “Pinch Technology”

Realizou-se no dia 30 de Junho no Hotel Penta, em Lisboa, o 1.º Seminário sobre Estudo Processual Integrado, promovido pela firma Linnhoff-March em colaboração com a Petrolabe. O Seminário, que reuniu algumas dezenas de representantes da Indústria e Universidade, foi conduzido pelo engenheiro Alan Eastwood, um dos elementos mais qualificados da Linnhoff-March e que possui uma vasta experiência na aplicação da “Tecnologia Pinch” a indústrias muito diversas: cervejas; adubos; petroquímica de olefinas e de aromáticos; farmacêutica; etc.

A “Tecnologia Pinch” formulada em 1975, pelo Prof. Bodo Linnhoff, encontra larga aplicação na Optimização de Processos. Oferece para tal uma base nova para o projecto de processos químicos integrados, onde é fundamental dispôr à partida da capacidade de previsão de objectivos de projecto (custos energéticos, investimento e flexibilidade) realistas e com sólidos fundamentos científicos.

Este seminário foi organizado pela Petrolabe — Gabinete de Projectos e Consultadoria à Indústria, correspondentes técnicos em Portugal, da Linnhoff-March.

Premiar inovações no domínio do ambiente

Estando a decorrer o Ano Europeu do Ambiente, o CEFIC - Conseil European des Federations de L'Industrie Chimique decidiu, na sua última Assembleia Geral, instituir um prémio designado por “CEFIC Environment Award”. Este prémio será atribuído pela primeira vez em 1988 e, posteriormente, de dois em dois anos.

O prémio será de 25,000 Ecu's e terá por finalidade premiar qualquer inovação que permita à Indústria Química contribuir de um modo positivo para a resolução de um problema ambiental.

O prémio será atribuído em Bruxelas, na Primavera de 1988, coincidindo com o encerramento do Ano Europeu do Ambiente, sendo o juri composto por seis eminentes personalidades Académicas, Autoridades Europeias e da Indústria.

Poderão concorrer pessoas em nome individual ou em grupo. Qualquer estabelecimento, instituição ou organização sob cujo auspício o estudo venha a ser elaborado deve estar localizado na Europa Ocidental e pertencer a um dos países onde o CEFIC disponha de uma Associação Membro.

O estudo deve ser apresentado num *dossier* contendo todas as informações necessárias: um relatório escrito pelo(s) candidato(s), documento(s) publicado(s) ou que possam vir a ser publicado(s) em revistas científicas, relatórios de avaliação de terceiros, etc.

O trabalho pode ser apresentado na língua de qualquer um dos países representados no CEFIC, sendo traduzido, em caso de necessidade, para inglês ou francês. **Os estudos deverão ser apresentados ao CEFIC até à data limite de 8 de Janeiro de 1988.**

Para mais informações contactar a Associação Portuguesa das Empresas Industriais de Produtos Químicos, Av. D. Carlos I, 45, 3.º, 1200 Lisboa (Tel.: 60 67 96/7).

Toulouse: fogo deixa na rua 250 investigadores

Na noite de 25 para 26 de Março de 1987, um incêndio destruiu o edifício de investigação de química da universidade Paul Sabatier em Toulouse.

Os laboratórios instalados neste edifício albergavam na grande maioria químicos orgânicos (síntese e físico-química orgânica, interacções moleculares e reactividade química e fotoquímica, química do fósforo e de organometálicos), mas existiam também laboratórios mais especializados em química-física (materiais, electroquímica, etc.).

Eram no total 10 laboratórios, 5 dos quais pertencentes ao CNRS, nos quais trabalhavam mais de 250 pessoas que viram os seus locais e meios de trabalho destruídos ou inutilizados.

As consequências deste drama são extremamente importantes. Para os responsáveis, são os esforços desenvolvidos ao longo de cerca de 20 anos de trabalho para colocar os seus laboratórios ao nível dos melhores que foram completamente gorados. Para os jovens investigadores, uma grande parte dos resultados experimentais ficou transformada em fumo e, como tal, há que repeti-los.

O fogo, que teve origem numa hotte do 1.º andar, propagou-se muito rapidamente aos andares superiores, lembrando assim o problema da segurança neste tipo de edifícios.

A direcção do CNRS dispôs-se a fornecer 20 milhões de francos para renovar o equipamento que lhe pertencia. Faltam ainda cerca de 80 milhões para repôr tudo no mesmo estado!

Graças à solidariedade dos químicos de Toulouse, uma parte dos sinistrados está realojada, utilizando muitos os pisos de trabalhos práticos da universidade.

Este sinistro é de tal modo impressionante que nele deveriam meditar todos os químicos, e as entidades oficiais competentes, levando a repensar problemas de segurança que este tipo de edifícios levanta.

100 anos depois de Mendeléeu, o difícil consenso...

Os leitores de certas revistas científicas podem notar que os autores de artigos referem a utilização de uma nova numeração das colunas da Tabela Periódica na designação dos grupos de elementos. Podemos encontrá-la em revistas da American Chemical Society, como por exemplo, a *Angewandte Chemie* edição internacional, a *Organometallics* e a *Inorganic Chemistry*. Este novo sistema foi estudado e aprovado pela Comissão de Nomenclatura de Química Inorgânica da IUPAC (CNCI), tendo em conta que a classificação até aqui utilizada de grupos A e B, com origem na classificação de Mendeléeu a 8 colunas (1896), pode ter como resul-

tado a confusão total, uma vez que as convenções americana e europeia são contraditórias.

Com o propósito de dar a conhecer aos químicos portugueses esta nova nomenclatura dos grupos de elementos, aqui deixamos a Tabela Periódica recentemente aprovada pela CNCI.

Formato recomendado para a Tabela Periódica dos Elementos

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac**															
*Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu																	
**Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr																	

A redescoberta da supercondutividade

As descobertas realizadas nos últimos meses no domínio dos supercondutores revestem-se de uma importância capital, comparável talvez à da invenção do transistor. A supercondutividade é uma propriedade que se manifesta pelo desaparecimento brusco da resistência eléctrica de alguns corpos quando arrefecidos abaixo de uma certa temperatura crítica, T_c . Desde há muito tempo que esta propriedade faz entrever uma vasta gama de aplicações que vão desde os comboios ultra-rápidos com sustentação magnética até aos circuitos integrados da micro-electrónica, passando pelo transporte e armazenagem sem perda de energia. Estas aplicações permaneceram, no entanto, sem desenvolvimentos significativos dado que, para manifestarem supercondutividade, os materiais tinham que ser arrefecidos a temperaturas muito baixas (da ordem dos 4 K, temperatura de liquefacção do hélio).

Durante anos os valores de T_c para novos materiais não variaram significativamente e ainda em 1980 o valor máximo de T_c rondava os 25 K para o Nb_3Ge . Foi há muito pouco tempo que se começou a investigar compostos de X-Ba-Cu-O, onde X é uma terra rara. Em Março de 1986 publicou-se uma estrutura de La-Ba-Cu-O, com $T_c=35$ K e alguns meses depois, La-Sr-Cu-O com $T_c=40$ K.

Foi já em 1987 que Paul Chu da Universidade de Houston anunciou a obtenção de $T_c=93$ K para uma fase de Y-Ba-Cu-O. Esta fase caracterizada como $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, com $x=0,19$, de estrutura ortorrômbica distorcida, é preparada facilmente através de CuO , Y_2O_3 e $BaCO_3$, a $950^\circ C$.

Mais tarde, em Abril deste ano, um grupo húngaro anunciou igualmente um valor de $T_c=105$ K para a mesma fase.

Muito recentemente, cientistas do National Physical Laboratory de Nova Deli estremeceram a comunidade científica com a notícia da obtenção de $Y(Ba, Sr)_2Cu_3O_8$, multifásico, que revela uma fase supercondutora de $T_c=299$ K ($26^\circ C$), embora não haja ainda confirmação deste valor. Segundo informações do próprio laboratório, o grupo ocupa-se presentemente da purificação da fase e posterior caracterização estrutural.

No espaço de alguns meses produziu-se uma modificação dramática no domínio da supercondutividade. Estas descobertas marcam o início de uma nova era e estão a provocar uma verdadeira euforia tanto no meio científico como no meio industrial. As aplicações são

imensas e fazem prever, para os próximos anos, uma modificação radical da paisagem técnica e industrial. Para mais informações sobre este tema leia-se por exemplo *La Recherche*, vol. 18, pgs. 954-959 (Julho-Agosto de 1987).

A função dos erros tipográficos nas publicações científicas

Há quem diga que C.W. Chu da Universidade de Houston cometeu um erro tipográfico voluntário nos dois artigos em que anunciava a descoberta de um novo material supercondutor. De facto, nos originais dos artigos enviados por Chu para a *Physical Review Letters* a fórmula do composto supercondutor apresentava um átomo de itérbio (Yb) que foi à última hora substituído por um ítrio (Y). Quando a revista saiu em 2 de Março de 1987, os artigos já mencionavam pois a terra rara correcta, isto é o ítrio. Terá sido um erro deliberado para ocultar até ao último momento a natureza exacta do composto descoberto? O que é certo é que, antes da publicação dos artigos, circularam nos meios científicos rumores de origem desconhecida segundo os quais os novos supercondutores seriam à base de itérbio.

Terá sido para evitar este tipo de fuga de informação que Chu cometeu o referido erro? É possível. A importância teórica e comercial da descoberta é suficiente para ampliar o significado desta pequena história.

O novo material supercondutor descoberto por Chu pode não só valer-lhe um prémio Nobel, como também dar-lhe muito dinheiro resultante das suas aplicações industriais. E Chu estava consciente disso dado que introduziu um pedido de registo de patente antes da publicação dos artigos referidos; e neste pedido não havia qualquer «erro».

Porque é que os electrões não caem no núcleo?

Na perspectiva da Electrodinâmica clássica, o electrão deveria «cair» no núcleo, pois todas as cargas aceleradas radiam energia.

A resposta convencional a esta questão situa-se no âmbito da teoria quântica do átomo iniciada por Niels Bohr: os electrões não podem cair no núcleo porque cada electrão tem que reter uma certa quantidade de energia, a chamada energia do estado fundamental; para «cair» no núcleo ele teria que radiar toda a sua energia e isso não lhe é permitido. Mas porque não? Muitos dos leitores deste Boletim já ensinaram aos seus alunos os rudimentos da teoria atômica e já se viram certamente confrontados com esta dificuldade. Em artigo recente (*Physical Review D*, vol. 35, pg. 3266), Harold Puthoff do Institute for Advanced Studies em Austin, Texas, sugere uma explicação interessante para este problema de fundo. Segundo ele o estado fundamental do electrão é um estado de equilíbrio dinâmico em que ele radia energia mas simultaneamente absorve energia do vácuo.

A ideia central desta interpretação da estabilidade dos átomos é a de qualquer volume do espaço, mesmo o espaço vazio, contém uma enorme quantidade de energia, chamada a energia do ponto zero. Este é o zero da escala das energias que medimos, mas o seu valor não seria nulo de acordo com a moderna teoria quântica.

Esta energia de fundo, este mar uniforme de energia não tem habitualmente relevância prática porque é homogéneo, é igual em toda a parte. No entanto a sua existência pode ser evidenciada experimentalmente por exemplo através da medida da força que se exerce entre duas placas metálicas muito próximas («efeito de Casimir») e que é interpretada como resultante de heterogeneidades na energia do ponto zero causadas pela presença das placas.

Sabemos que uma carga eléctrica acelerada (mundando quer a sua velocidade, quer a direcção do seu movimento) radia energia electromagnética. Se o electrão se comportasse desta forma «clássica» radiaria energia ao mover-se em torno do núcleo e acabaria por cair nele. De acordo com os cálculos de Puthoff (realizados no âmbito de uma técnica de análise designada por electrodinâmica estocástica) o electrão radia de facto energia ao orbitar o núcleo tal como o faria uma partícula «clássica». Mas também absorve energia do campo electromagnético de fundo. O estado fundamental do electrão seria o resultado do equilíbrio entre a energia radiada e absorvida, dependendo portanto da presença desse mar de energia electromagnética de fundo.

A importância das fibras sintéticas na indústria têxtil

Nos nossos dias, a indústria têxtil utiliza grande quantidade de fibras sintéticas devido à sua eficácia no reforço de tecidos à base de fibras naturais como o algodão e a lã. Em 1889, Chardonnet apresentou na exposição universal a primeira peça de tecido em seda artificial. Logo nesse ano, a sua produção foi de 15 t. entre 1900 e 1986, enquanto a produção de algodão cresceu de 3 Mt para 16 Mt e a de lã de 0,7 Mt para 1,6 Mt, as fibras sintéticas aumentavam a sua produção de 1000 t de rayonne (único sintético produzido em 1900) para 3,2 Mt de fibras celulósicas (rayonne, viscosa e acetato), e 13,3 Mt de polímeros de síntese (poliamidas, poliésteres e poliacrílicos) ultrapassando no seu conjunto a produção de algodão em 500 000 t. De notar que desde 1980 a produção se encontra praticamente estabilizada nos países desenvolvidos (EUA, Europa e Japão) enquanto aumenta claramente nos países do Extremo Oriente.

(Mt = 10⁶ toneladas).

Metanol para combater a poluição

A Califórnia é o estado americano que mais problemas tem com a poluição do ar, devido aos vapores de escape dos seus 22 milhões de automóveis. Segundo um esquema anunciado pela comissão de energia da Califórnia, 25 estações de combustível vão começar a vender metanol pelos finais de 1988, prevendo-se que no fim deste século 10 a 15% dos veículos daquele estado utilizem este álcool em substituição da gasolina. O metanol pode vir a ser uma alternativa importante à gasolina, pois é facilmente produzido a partir do carvão e gás natural (existente em abundância nos Estados Unidos), além de originar metade dos produtos de oxidação da gasolina. O maior problema que advém da utilização do metanol como combustível, é a formação de formaldeído, potencialmente cancerígeno, formação

essa que é três vezes maior que no caso da gasolina. No entanto, não deverá ser difícil converter o formaldeído em dióxido de carbono e água.

Bactéria devoradora de borracha

Será que vamos poder livrar-nos da borracha inútil sem necessidade de a queimar? A partir de agora isso parece ser possível utilizando um processo biotecnológico, menos poluente e menos energético, com a ajuda de um micro-organismo — *Nocardia*. O japonês Kensuke Furukawa, do departamento de fermentação do instituto de ciência aplicada e de tecnologia de Tsukuba, acabou de seleccionar uma espécie filamentosa desta bactéria que, quando colocada num meio de cultura que só tenha borracha como nutriente orgânico, consegue digerir completamente lâminas finas de borracha de 0,5 mm por 15 cm, em 3 semanas. Objectos, tais como luvas, são portanto facilmente digeridos por esta bactéria; mais difícil serão, porém, os pneus usados que constituem 90% de produtos inúteis de borracha! O rendimento de borrachas carregadas de enxofre e carbono é, também, muito fraco: 3 a 6% de digestão em 8 semanas.

Formaldeído no banco dos réus

Após mais de sete anos de estudos, a agência americana para a protecção do meio ambiente (EPA) acaba de anunciar a sua conclusão: o formaldeído é, provavelmente, cancerígeno para o homem. O formaldeído é um gás muito utilizado na indústria (química, de couro, têxtil, de madeira, etc.), e a sua solução aquosa, o formol, serve de desinfectante e conservante!!!

Plutónio: a reciclagem final

Um dos maiores problemas das centrais nucleares é constituído pelos desperdícios. Até agora, o destino das lamas altamente radioactivas era o contentor de chumbo no fundo do oceano. Por este motivo, o Japão, e na Europa a França, Grã-Bretanha, Alemanha Federal, Bélgica, Suíça e Itália resolveram reciclar os desperdícios dos reactores nucleares de modo a isolar o Plutónio e o Urânio, que podem voltar a ser utilizados nos chamados reactores supergeradores (reactores que não usam moderadores) e nos reactores de água leve.

Se este projecto for avante, pensa-se que até ao ano 2000 mais de 300 toneladas de Plutónio serão processados a uma média de 25 toneladas/ano, quantidades astronómicas quando comparadas, por exemplo, com a bomba de Nagasaki que continha somente 6 kg de Plutónio.

Embora a energia obtida após a reciclagem dos desperdícios nucleares fique mais cara do que a obtida através das centrais «clássicas» de Urânio (mais 0,001 dólares/kWh), este projecto poderá tornar-se viável tendo em conta as quantidades produzidas de Plutónio relativamente puro, elemento fissil das armas nucleares.

Curva de fusão do ferro determina temperatura do centro da terra

O ferro é o principal constituinte tanto do núcleo sólido interior da Terra como do seu núcleo exterior líquido.

Williams et al. (1) admitiram que na fronteira entre os dois núcleos (sólido e líquido), o ferro se encontra no seu estado de equilíbrio termodinâmico ao longo da linha de fusão. A determinação experimental desta última, permitiu assim calcular a temperatura do centro da Terra, uma vez que a pressão pode ser facilmente estimada em qualquer ponto do interior do planeta.

A curva de fusão foi determinada usando uma técnica de altas pressões estática (célula de diamante) até 10 GPa (2), e uma dinâmica (ondas de choque) até 300 GPa.

A fronteira entre os dois núcleos encontra-se a uma pressão de 330 GPa, pelo que a extrapolação dos dados experimentais permite encontrar uma temperatura de 7600 ± 500 Kelvin.

Este valor foi corrigido para a presença de impurezas, que têm o efeito de diminuição do ponto de fusão, originando uma temperatura de 6600 K para a verdadeira liga de ferro existente no interior da Terra. Finalmente, a quase isotermicidade do núcleo interior sólido do planeta, permitiu estabelecer o valor de 6900 K para a temperatura do centro da Terra. Este dado constitui o primeiro valor experimental do limite superior da temperatura do nosso planeta.

A idade da Via Láctea

Estimativas recentes da idade das estrelas da Via Láctea sugerem que a nossa galáxia não terá mais de 12 milhares de milhões (bilhões americanos) de anos. É uma idade mais tenra do que os 18 bilhões de anos até há pouco atribuídos às estrelas mais antigas, e coaduna-se melhor com a idade do Universo — cerca de 15 bilhões de anos.

Estas conclusões baseiam-se em medidas espectroscópicas da abundância relativa do tório-232 e do neodímio-142 nas atmosferas estelares, realizadas por H. Butcher (Kapteyn Astronomical Institute, Holanda). O tempo de vida do tório-232 é de 20 bilhões de anos ao passo que o neodímio-142 é estável. Por isso a razão entre as abundâncias de tório e neodímio deverá ser tanto mais pequena quanto maior for a idade de uma estrela. Os resultados obtidos por Butcher não revelam qualquer variação da razão Th/Nd com a idade das estrelas o que significa que, mesmo no caso das estrelas mais antigas, não houve ainda tempo suficiente para um decaimento significativo do tório (Nature, vol. 327, pg. 27).

Há polímeros no núcleo do cometa Halley

As espécies químicas detectadas em torno dos cometas são moléculas e radicais simples que se pensa serem fragmentos de moléculas-mãe mais complexas presentes no núcleo e destruídas sob o efeito da radiação solar.

(1) Science, 236, 181, Abril 1987.

(2) 1 GPa = 10^9 Pa = 10^{10} atm.

Até há pouco tempo nada se sabia de concreto acerca da natureza química dessas moléculas-mãe e os astroquímicos tinham alguma esperança que as missões espaciais recentemente dirigidas ao encontro do cometa Halley pudessem dar algum contributo para o esclarecimento deste mistério. Tal parece estar a acontecer. Com efeito, a análise dos dados fornecidos por um instrumento que foi transportado pela nave Giotto da Agência Espacial Europeia parece pôr em evidência a existência no cometa de polioximetileno, um polímero de cadeia linear resultante da polimerização do formaldeído (Science, vol. 237, pgs. 626 a 628). O referido instrumento designado por PICCA (Positive Ion Cluster Composition Analyser) mediu a composição mássica dos gases que rodeiam o cometa até 210 unidades de massa atómica (u.m.a.) tendo obtido um espectro que apresenta picos a 61, 75, 91 e 105 u.m.a.

O regular espaçamento destes picos (cerca de 15 u.m.a.) sugere a presença de uma molécula polimérica constituída por carbono, hidrogénio e oxigénio susceptível de ser dissociada em fragmentos pela radiação solar.

Bases lunares

Após os desastres sofridos que alteraram o calendário previsto no campo da exploração espacial, a NASA propõe, num futuro previsível, a exploração tripulada de Marte, a continuação da exploração não tripulada do Sistema Solar e a montagem de uma base permanente na Lua.

Segundo estudos já efectuados, onde a NASA ainda investe só 1,2 milhões de dólares/ano (cerca de 170 mil contos/ano), os voos tripulados à Lua irão recomeçar por volta do ano 2000 e as bases lunares permanentes estão previstas para 2010.

Os objectivos deste programa são essencialmente astronómicos, com a montagem de um observatório na face oculta da Lua de modo a anular a influência da Terra, e de ordem económica, pois do solo lunar pode extrair-se sílica, presente em alto teor, ferro em elevado grau de pureza, e oxigénio, constituindo este 40% em peso do solo lunar e podendo ser aproveitado quer para a manutenção da vida das bases, quer como comburente das naves espaciais.

Planos Comunitários em Biotecnologia

Está aberta discussão sobre um documento comunitário intitulado «Biotecnologia na Comunidade: estímulo ao desenvolvimento agro-industrial». É proposto um programa a longo prazo de projectos piloto em biotecnologia, baseado na consulta e discussão com grupos de interesse, e com vista a complementar programas de investigação já existentes.

As áreas prioritárias incluiriam indústrias alimentares e agro-alimentares, químicas e farmacêuticas, e de produtos florestais. Sugere-se o encorajamento da investigação em novos usos para produtos agrícolas (especialmente em sectores não alimentares), bem como métodos alternativos de produção de bens nos quais a comunidade é deficitária.

Associações de industriais mostram-se reticentes quanto às dimensões e alcance do plano. Manifesta-se no entanto em vários sectores, um desejo crescente de

considerar a investigação sobre novos recursos e fontes renováveis, tendo como base a viabilidade económica. Note-se, a título de exemplo, que a produção de álcool a partir de biomassa (açúcar de beterraba) resultaria num custo adicional de cerca de \$75 por barril, em relação ao processo tradicional a partir de derivados de petróleo. Deste modo, seria viável a obtenção de etanol de alta pureza para fins químicos, mas não rentável uma produção em larga escala de etanol corrente. Neste último caso, o carvão seria mais atraente do que a biomassa, além de que as infraestruturas existentes, preparadas para a indústria do petróleo, se revelariam inadequadas.

Uma outra convicção é a de que, em certas áreas, ainda nos encontramos em fase de investigação, e não totalmente prontos a arrancar com projectos piloto. É ainda opinião de certos quadrantes que, longe de ajudar a reduzir os excessos comunitários, poder-se-ia cair na situação contrária. A menos que se procurasse, segundo outros, uma orientação no sentido da melhoria da qualidade dos produtos. Membros da Concertation Unit for Biotechnology in Europe (CUBE) salientaram, no entanto, que o propósito do documento não é ultrapassar o problema dos excessos agrícolas da comunidade.

À medida que o fosso entre a indústria e a agricultura se estreita e aumentam as preocupações com o ambiente, assim a biotecnologia se torna mais desejável.

Adaptado de Chemistry in Britain, Abril 1987.

Fundada nova sociedade científica europeia

A European Society for Photobiology (ESP) foi fundada na reunião inaugural que decorreu durante o First European Congress of Photobiology em Grenoble, França, em Setembro de 1986. O objectivo desta nova sociedade é o de estimular e facilitar o intercâmbio de ideias entre investigadores europeus (e outros) interessados nos vários ramos da fotobiologia.

A ESP integra uma vasta gama de áreas de interesse que incluem fotossíntese, visão, fotomedicina, fotomovimento, fotomorfogénese, fotosensibilização, espectroscopia, fototecnologia e outras.

A filiação na ESP está aberta a todos os investigadores interessados mediante o pagamento de uma quota anual de 20 SFr. Para mais informações contactar Dr. Rex M. Tyrrell, Swiss Institute for Experimental Cancer Research, CH-1066 Epalinges s/Lausanne, Ch. des Boveresses, Suíça.

Secar sem calor Secar ou encarquilhar?

Que fazer se a sua inestimável colecção de livros ganha humidade?

Qual a solução? Utilizar calor? Não parece boa ideia pois o efeito provocado nas folhas de papel e no couro estragaria os livros.

Qual a opção que resta? Exacto, baixa pressão é a solução.

Foi o que aconteceu em Hagley, Hall Stourbridge (Reino Unido). Para tal, transferiram-se os livros para um frigorífico a fim de evitar a formação de bolor.

Em seguida, os livros foram colocados numa câmara de baixa pressão, utilizando-se sílica-gel para controlar a humidade e timol para evitar o crescimento de fungos. A pressão da câmara é então reduzida gradualmente permitindo a evaporação da água.

Mais uma vez se prova a velha máxima «a necessidade faz o engenho».

O mundo dos plásticos

Surgiu uma nova publicação no Reino Unido editada pela Federação Britânica de Plásticos. Intitula-se *O mundo dos plásticos* e foca aspectos da produção e enquadramento do plástico no mundo de hoje, sendo distribuída pelas escolas e bibliotecas britânicas.

Produtos naturais

Encontra-se em fase de lançamento pela Royal Society of Chemistry um novo boletim mensal intitulado *Natural Product Updates*.

Dirigido sobretudo àqueles que trabalham em indústrias como a farmacêutica, médica, alimentar e agro-alimentar, tabaqueira, etc., permitirá uma cobertura a nível mundial dos desenvolvimentos recentes no domínio da estrutura e biossíntese de produtos naturais. O boletim será construído a partir de recolhas efectuadas nas principais publicações no campo da química e os vários itens ordenados segundo a temática abor-

dada. Em cada um dos trechos publicados constará não só o nome do autor, como também a classificação taxonómica do produto, nome comum, tipo de composto e fontes. Incluir-se-ão ainda diagramas detalhados da estrutura.

Os interessados poderão obter informações da Royal Society of Chemistry, Universidade de Nottingham, Nottingham NG7 2RD.

Contributo de artistas para «Química e Arte»

Os leitores interessados em adquirir as obras de arte reproduzidas na contracapa do n.º 28 deste Boletim (Junho de 1987) deverão enviar as suas propostas para a Direcção do Boletim até ao dia 16 de Novembro.

Se houver coincidência nas ofertas máximas haverá sorteio que se efectuará no dia 18 de Novembro na presença do Secretário-Geral da SPQ. As referidas obras encontram-se na sede da SPQ onde podem ser vistas pelos interessados, o que aconselhamos vivamente até porque a reprodução de algumas delas (sobretudo as de José Augusto, Maria Gabriel e Martha Telles) saiu um tanto deficiente diminuindo o seu impacto em particular no que se refere ao contraste das cores. O leitor interessado encontrará neste boletim uma folha destacada com o formulário a preencher e com mais algumas especificações relativamente às obras referidas.



SOPOEQUIP

PRODUTOS E EQUIPAMENTOS PARA A INDÚSTRIA E LABORATÓRIOS LDA

DINAMISMO - QUALIDADE
SERVIÇO
ESCOLHA - EFICIÊNCIA

*PEÇA-NOS A LISTA DAS NOSSAS REPRESENTADAS
ALGUMA LHE INTERESSARÁ!*

Estamos à distância do seu telefone...

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 12 - 1.º
TEL. (01) 259 44 62 - 259 46 15

2625 PÓVOA ST.ª IRIA
TELEX 43926 DISO-P

Química, uma ciência experimental?

Aspectos históricos do empirismo racional

A.M. Amorim da Costa*

1. O empirismo racional de F. Bacon

A Ciência Moderna reverencia em Francisco BACON (1561-1626) «o maior, mais universal e mais eloquente dos filósofos»⁽¹⁾ pela consagração que ele fez do chamado *empirismo racional*. No quadro específico deste, o caminho de que dispõem as Ciências da Natureza para descobrir a verdade é a experimentação seguida de indução. No seu domínio, o cientista vive do recurso à observação cuidadosa e à experimentação para se certificar dos factos e para os ordenar o mais perfeitamente possível. Desse recurso nascem as hipóteses que visam explicar os factos observados e sua interconexão; e neelas se testam, no desejo de se arvorarem em leis de carácter universal. É recorrendo à experiência que as Ciências da Natureza tentam descobrir o que esta esconde e comprovam o que já descobriram, recorrendo, inclusive, a experiências artificiais que de modo algum são contra a Natureza mas em que se «submete esta à tortura» para lhe arrancar os seus segredos que ela talvez nunca confessasse “voluntariamente”⁽²⁾. Por isso elas se dizem *ciências experimentais*.

Um século antes de F. Bacon, já Leonardo da Vinci (1452-1519) havia afirmado que «as ciências que não nascem da experiência, a mãe de toda a certeza, são vãs e cheias de erros». Deve notar-se, todavia, que o empirismo que está na base da revolução científica dos séculos XV-XVII é um empirismo *racional*. E por esta sua característica ele se distingue do experimentalismo que havia sido professado e defendido na Antiguidade (de Alcmeon de Crotona aos helenistas) e na Idade Média (dos árabes a R. Grosseteste ou Rogério Bacon). O essencial, decisivo e verdadeiramente novo no empirismo que informou a constituição da ciência moderna não é o desenvolvimento do experimentalismo, mas o seu carácter racional, que se traduziu na eclosão da ciência matemática da natureza como requisito que simultaneamente possibilita e torna necessária a experimentação, numa atitude científica em que a teoria é que orienta a observação, suscita a experiência e lhes dá um sentido científico.

Foi no quadro do empirismo racional que a Química se tornou uma Ciência autónoma. Que o recurso contínuo à experimentação tem sido a mola real do seu desenvolvimento está igualmente patente na atitude e testemunho de um Vicente Coelho de Seabra (1764-1804), ilustre químico português dos tempos de Lavoisier, como na filosofia subjacente ao chamado Projecto CHEM STUDY⁽³⁾, nos nossos dias, ecos pontuais da atitude e testemunho de toda uma pléiade de cultores desta ciência.

Vicente Coelho de Seabra:

«Se reflectirmos sobre a origem dos conhecimentos humanos ainda os mais metafísicos, veremos que todos são devidos à observação e experiência. Mas nenhuma ciência precisa mais deste socorro, do que aquella que trata examinar e conhecer a natureza dos corpos. A química he a que toma isto a seu cargo. (...) A experiência pois he o fio Ariádneo com que nos devemos conduzir por entre este labirinto do conhecimento dos corpos»⁽⁴⁾.

Projecto CHEM STUDY:

«As actividades da ciência começam com a observação. A observação é mais útil quando as condições que a afectam são cuidadosamente verificadas. Uma condição é verificada quando é fixa, conhecida e pode ser modificada deliberadamente, se o desejarmos. Esta verificação é obtida da melhor maneira num local especial — num laboratório. Quando a observação é feita debaixo de cuidadosa verificação, dignificamo-la com um nome especial — *uma sequência verificada de observações é uma experiência*. Toda a ciência se constrói sobre os resultados da experiência»⁽⁵⁾.

Não é possível, porém, falar de idêntica unanimidade de atitude e/ou testemunho quando se trata de definir o entrosamento da experimentação na componente teórica em que se opera a generalização e sistematização das observações factuais. Os defensores do carácter experimental das Ciências da Natureza estão, muitas vezes, em desacordo sobre a natureza do apoio prestado pela experiência à teoria, ou por esta à experimentação. Esse desacordo, particularmente patente entre os fiéis sequazes da lógica indutiva do empirismo racional de F. Bacon e os neopositivistas, também conhecidos pelo nome, à primeira vista um pouco desconcertante, de *empiristas lógicos*, estende-se ao próprio conceito de experiência e ao carácter paradigmático das teorias.

Nem sempre olhada por uns e por outros, do mesmo ponto de vista, a relação experiência/teoria é para eles objecto de desencontradas posições e assunto de calorosos debates. Que estes são questão acesa, contemporânea e actual, prova-o, por exemplo, a última conferência organizada pela União Internacional para a História e Filosofia da Ciência (IUHPS), realizada em Ghent (Bélgica), de 25 a 30 de Agosto de 1986, toda ela subordinada ao tema *Theory and Experiment*. Uma breve análise de carácter histórico, ajudará a compreendê-los melhor.

* Departamento de Química, Universidade de Coimbra.

2. Ciência ou Arte?

Em 1786, Kant negava categoricamente a possibilidade de a química poder alguma vez tornar-se matemática e dedutiva, do que resultaria nunca ela poder ser mais que uma arte engenhosa, e nunca uma ciência verdadeira. *Pyrosophia* ou *philosophia per ignem*, ela estaria condenada a simples manuseamento de dados experimentais, estando-lhe vedado filosofar sobre as últimas causas das coisas, distintivo nobre da verdadeira ciência.

Os químicos do século XVIII lutaram arduamente contra este veredicto kantiano que pendia sobre a sua actividade, e tudo fizeram para mostrar à comunidade científica que ela era também uma verdadeira ciência. Defendendo-se, os tratados químicos de então procuram realçar a componente especulativa para que não fossem confundidos com simples "artistas". Mikhail Lomonossow, em 1741, intitula o seu manual de química *Elementa Chimiae Mathematicae*, fazendo notar, como postulado básico, que o químico verdadeiro deve ser simultaneamente um teórico e um prático (6). Por sua vez, Macquer, em 1749, intitula um seu primeiro tratado de química *Éléments de Chymie Theorique*, que continuaria, em 1751, com um outro intitulado *Éléments de Chymie Pratique*. Para ele, só a química teórica que descrevia no primeiro destes seus tratados permitiria «uma representação lógica do básico para o complexo, do conhecido para o desconhecido»; todavia, à química prática competiria ditar a forma dessa representação (7).

O mesmo Macquer, no seu celebrado *Dictionnaire de Chymie* de 1778, frisa repetidamente que há nesta ciência uma estreita conexão entre raciocínio e experiência, contrapondo à *química experimental* uma *química raciocinada* (8). Outros autores da mesma época falam numa *química dogmática* e numa *química prática ou experimental*, numa *química racional ou pura* e numa *química aplicada* (9). Vicente Coelho de Seabra, no já citado Discurso Preliminar do seu manual *Elementos de Chimica* faz outro tanto: «depois de muita meditação, julguei a propósito dividir a chimica em duas partes: teórica e prática: na 1.^a exponho todos os princípios preliminares e toda a theoria (...). Na 2.^a parte, em que trato da chimica prática, classifiquei todos os corpos, que podem entrar no nosso exame» (10).

Nesta reivindicação do estatuto de verdadeira ciência contra o estigma de mera arte que muitos teimavam em impôr aos seus cultores, teoria e prática são entendidas como separação entre uma disposição intelectual e uma actividade manual. Não é, propriamente, a natureza do método que está em causa, mas antes a reivindicação do reconhecimento social do lugar do químico adentro do sistema científico, procurando demonstrar que ser químico era real actividade académica e não simples actividade de laboratório com carácter oficial.

O próprio título académico que era dado, então, aos professores de química, *demonstrador*, era indício de certo estigma diferenciador contra que se impunha lutar mostrando que o autêntico químico era simultaneamente um teórico e um prático. Johann C. Zimmermann deu-se mesmo ao trabalho de escrever um manual onde se traçavam as normas que deveriam presidir à educação de um verdadeiro *chemicus theoretico-practicus* (um químico teórico-prático) em vez de um simples *empírico* (11).

Da distinção entre *química raciocinada* e *química prática* nasceu a divisão da química em *química pura* e *química aplicada*, cunhada, em 1751, pelo químico sueco J.G. Wallerius (1709-1785) no seu tratado *Bref om chemiem ratta Beskaffenhet*. Neste tratado, a relação entre teoria e prática não é também considerada do ponto de vista da metodologia que deva presidir ao conhecimento químico, mas antes do ponto de vista da utilização possível do mesmo, ao serviço das necessidades do Homem. A química aplicada, em qualquer das suas áreas (*litúrgica*, a química das pedras; *halúrgica*, a química dos sais; *telúrgica*, a química do fogo; *metalúrgica*, a química dos metais; *hyalúrgica*, a química do vidro; *cromática*, a química das cores; etc.) deve guiar-se pela química pura como seu comum «fundamento, norma e conduta» (12).

Com esta divisão que preponderou por completo ao longo de todo o século XIX, adaptando-se bem ao racionalismo filosófico e cientismo iluminista, e que ainda hoje perdura, bem patente, por exemplo no nome da União que superintende internacionalmente em matéria de normas químicas, a IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), a terminologia "química prática" caiu quase em desuso. Por sua própria afirmação no "conclave" das ciências, a química deixou de ter necessidade de reivindicar mais o estatuto de ciência. Nem o peso ingente da autoridade filosófica de Kant pôde impedir o total desmoronamento da problemática em termos de *ciência* ou *arte*. E deste ponto de vista, deixou de ter qualquer interesse a afirmação do carácter teórico em contraposição ao carácter experimental (e vice-versa) da ciência química.

3. Experiência vs. Teoria, uma relação de simbiose?

Dizer que «toda a ciência se contrói sobre os resultados da experiência» (5) é afirmar apenas que a experiência é a base essencial de todo o conhecimento da realidade; não é, de modo algum, pôr de parte, nem sequer subestimar, o valor da teoria. «A teoria proporciona o quadro conceptual que torna a experiência inteligível. A experiência introduz os teóricos em novos domínios da natureza que por vezes exigem uma revisão da própria concepção da natureza» (13). Envolto na realidade experimental que os cerca, a qual abrange as chamadas *experiências imaginárias, mentais ou ideais* (14), os teóricos tentam demonstrar experimentalmente as suas teorias; tanto como expô-las numa linguagem precisa e rigorosa, preocupa-os que elas se confinem estritamente aos dados empíricos. Por sua vez, os experimentalistas tentam formular empiricamente teorias que lhes ofereçam satisfatória sistematização de suas observações.

Define-se assim uma relação de simbiose entre teoria e experiência que o carácter matemático e abstracto da teoria quântica, no primeiro quartel deste nosso século XX, e a metodologia científica dos neopositivistas questionam vivamente.

Ernest Mach (1838-1916), um dos criadores do chamado *empiricriticismo*, defendeu que aos físicos assiste o direito de usarem ideias e princípios não inferidos necessariamente da experiência; não devem, todavia, perder-se com ideias a que não possa ser dado um significado concreto e preciso através de operações experimentais. Quer dizer, para se manter fiel ao seu estatuto intrínseco de Ciência Experimental, toda e qualquer teoria física que não possa ser provada experimentalmente deve ser abandonada. Positivista convicto, Mach

defende que a realidade física é definida por operações empíricas reais, não por fantasias da nossa mente⁽¹⁵⁾. A mesma ideia está subjacente ao chamado *método postulacional de Einstein* em que o cientista parte do mundo da experiência e das experiências para a abstracção de postulados absolutos, num salto conceptual que está muito para além daquilo que qualquer experiência possa verificar, e antes mesmo de possuir qualquer dado que o apoie, somente depois se servindo desses postulados absolutos para deduzir resultados teóricos específicos que possam ser experimentalmente verificados. O salto conceptual em causa é tido como salto intuitivo, uma espécie de suposição inspirada firmada tão somente numa intuição física que transcende a experiência e que, conseqüentemente, não pode ser deduzida racionalmente a partir desta. No entanto, a sua validade é aferida pela experiência. As leis gerais, a teoria, são válidas na medida mesma em que cumpram o seu objectivo que é a racionalização das experiências. Neste mesmo contexto, Dirac afirmava ser objectivo único da Física Teórica calcular resultados que possam ser comparados com dados experimentais em vista de adequada racionalização⁽¹⁶⁾.

Este mesmo tipo de problemática informa o pensamento do chamado *Círculo de Viena* formado nos anos que se seguiram à Primeira Guerra Mundial, por um grupo de proeminentes investigadores no domínio da filosofia da ciência, cujo objectivo era promover a aproximação entre a filosofia e as ciências exactas, numa união duradoura e fecunda⁽¹⁷⁾.

É preocupação básica deste círculo de pensadores a defesa do empirismo científico: todo o conhecimento válido baseia-se, directa ou indirectamente, na experiência. Nesta defesa, preocupa-os muito mais a fundamentação, legitimização e sistematização desse conhecimento do que o modo como a ele se chega, nas mais variadas situações factuais. Muito mais que os factos reais, necessariamente singulares, preocupa-os definir o caminho (a metodologia) que deles leva ao estabelecimento de leis naturais dotadas da maior universalidade possível, meta final verdadeiramente visada por todas as Ciências da Natureza.

Dessa metodologia nos dá conta, por exemplo, a obra *The Logic of Scientific Discovery* de Karl Popper⁽¹⁸⁾, um dos mais representativos pensadores do Círculo de Viena: o ponto de partida do estabelecimento das leis científicas não são os dados dos sentidos, nem as observações e/ou experiências enquanto tais, mas sim princípios genéricos que às mesmas dizem respeito, que devem ser tomados como *sentenças protocolares* sobre que deve operar o trabalho científico no sentido de as *verificar* ou *falsificar* experimentalmente.

As leis naturais enquanto tais não são meramente os resultados observados directamente; generalizando-os, ultrapassam-nos. E não há processo lógico ou matemático que justifique adequadamente o salto de que decorre essa ultrapassagem. Porque é impossível verificar a universalidade das leis gerais, o procedimento que se impõe como mais lógico será partir dessa mesma universalidade tomada como hipótese de trabalho e tentar infirmá-la por um processo empenhado na sua falsificação. Na medida mesma em que tal universalidade assumida como hipótese resista à falsificação a todo o custo tentada, poderá a hipótese ser tomada como lei geral; só que jamais será possível saber se uma determinada lei geral foi ou não testada até à exaustão

quanto à universalidade! Conseqüentemente, a ciência será sempre uma ciência em aberto.

Nesta visão, a teoria não depende minimamente da prática, do ponto de vista de necessidade intrínseca, para se estabelecer, mas apenas para se manter. A teoria não precisa da prática para se definir e organizar como sistema, mas tão somente para se solidar, em desejada (e talvez desesperada!) resistência ao tempo. Neste sentido, dizer que a *química é uma ciência experimental* não é exigir que os conceitos em que se sistematiza sejam elaborados, necessariamente, a partir de factos observados e experiências realizadas; mas tão somente exigir que esses conceitos resistam a toda e qualquer tentativa de falsificação, em si-mesmos e nas suas implicações, por parte de factos e experiências incontestáveis.

Poderemos então concluir com De Broglie: «si trançhée que paraisse à première vue la distinction entre la découverte expérimentale et l'invention théorique, une étude plus attentive ne tarde pas a atténuer considérablement, car elle montre que la découverte des faits expérimentaux, du moins dans la science actuelle, est a bien des égards une invention tandis que l'invention théorique est en quelque mesure une découverte»⁽¹⁹⁾. Porque o referencial do conhecimento sistemático que a constitui é a experiência, não importa se como fonte em que foi bebido, se como teste em que foi creditado, a *Química é uma ciência experimental*.

Notas

- (1) — J.R. d'Alembert, *Encyclopédie ou Dictionnaire Raisonné des Sciences, des Arts, des Métiers* (Luques, Paris, 1758-1776).
- (2) — Este empirismo racional nasceu numa oposição frontal ao dedutivismo aristotélico. Situadas no contexto de tal empirismo, as considerações que constituem o presente trabalho não ignoram que, ao contrário do que muitas vezes se pensa, a atitude aristotélica tem, ainda em nossos dias, fervorosos adeptos. Recorde-se, a título de exemplo, a polémica de que se fez eco a revista Nature, em 1937, a propósito de *Modern Aristotelianism* (Nature, vol. 139, pp. 997-1026), ou então as palavras do consagrado cientista que foi A. Eddington: «não há nada em todo o sistema de leis da Física que não possa ser deduzido sem qualquer ambigüidade a partir de considerações epistemológicas (...). Uma inteligência familiarizada com o nosso Universo deveria ser capaz de conseguir todo o conhecimento da Física que nós atingimos por experimentação» (A Eddington, *Relativity theory of Protons and Electrons*, 1936, pg. 327).
- (3) — O Projecto CHEM STUDY é um projecto desenvolvido nos anos 60, nos EUA, por um grupo de cientistas e professores universitários, sob o patrocínio da National Science Foundation, cujo objectivo fundamental era "ver" a natureza da química a partir da consideração dos problemas que interessam aos químicos.
- (4) — V. Coelho de Seabra, *Elementos de Química* (Real Officina da Universidade, Coimbra, 1788), pg. V.
- (5) — G.C. Pimentel, *Química uma Ciência Experimental* (Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1976), pg. 2.
- (6) — M.W. Lomonossov, in *Ausgewählte, vol. I: Elementa Chymiae Mathematicae* (Berlim, 1961).
- (7) — P.J. Macquer, *Éléments de Chymie Théorique* (Paris, 1749); id. *Éléments de Chymie Pratique* (Paris, 1751).
- (8) — P.J. Macquer, *Dictionnaire de Chymie contenant la théorie et la pratique de cette science* (Paris, 1778).
- (9) — A. Rüdiger, *Systematische Anleitung zur reinen und überhaupt applicisten allgemeinen chymie* (Leipzig, 1756); C.E. Weigel, *Einleitung zur allgemeinen scheidekunst* (Leipzig, 1788).
- (10) — V. Coelho de Seabra, *O Cit.*, pp. X-XI.
- (11) — J.C. Zimmermann, *Allgemeinen Grundsätze der theoretisch-practischen chemie* (Dresden, 1755).
- (12) — J.G. Wallerius, *Bref om Chemiens ratta Beskaffenhet, Nytt och Warde* (Upsala, 1751), pp. 7-28.
- (13) — H.R. Pagels, *O Código Cósmico, A Física Quântica como linguagem da Natureza* (Ed. Grádiva, Lisboa, 1986), pg. 394.
- (14) — Encontra-se já em Galileu um vestígio destas experiências

mentais — as célebres *Gedankenexperimente*. A elas recorrem, todavia, com maior consciência e consistência os teóricos da física do nosso século, de Einstein a Heisenberg. Trata-se de experiências que se não podem realizar, por manifestas dificuldades técnicas, das quais se “imagina” o desenvolvimento por recurso a todos os conhecimentos que se possuem do problema, enquadradas num projecto muito preciso e numa discussão que se reveste de toda a seriedade e credibilidade (ver, por exemplo, ref. 18, Apêndice XI, pp. 442 ss., ou A. Koyré, *Galileo's Treatise "De motu gravium": the use and abuse of imaginary experiment* in *Revue d'Histoire des Sciences*, 13 (1960), pp. 197-245, reproduzido in *Methaphysics and Measurement:*

Essays in the Scientific Revolution, Ed. Chapman & Hall, Londres, 1968, cp. III).

(15) — H.R. Pagels, *O. Cit.*, pp. 30,66.

(16) — Citado in *Editor's Outlook*, *J. Chem. Educ.*, 8, 209 (1931).

(17) — V. Kraft, *The Viena Circle; the origin of neo-positivism* (Greenword' Press, London, 1953).

(18) — K.R. Popper, *The Logic of Scientific Discovery* (Basic Books Inc., New York, 1959).

(19) — Cit. in H. Margeneau, *The Nature of Physical Reality — A Philosophy of Modern Physics* (McGrawHill Book C.ie, N.Y., 1950) pg. 99.

A regra do octeto

De acordo com Kossel [1] quando dois elementos se combinam para formar um composto, dá-se uma troca de electrões de modo que ambos adquirem o número de electrões do gás “inerte” mais próximo. Contudo nem todos os compostos são iónicos, pelo que Lewis veio, quase simultaneamente, a contemplar a formação de compostos covalentes através da partilha de pares de electrões [2]. Esta veio dar origem à regra do octeto, também aplicável aos compostos iónicos. Se bem que Lewis reconhecesse que nem todos os compostos obedecem à regra do octeto, na divulgação da obra isto não foi normalmente tomado em consideração. Actualmente um grande número de livros de Química Geral acentuam a regra do octeto [3-4-5] e discutem, imediatamente a seguir, algumas excepções. Alguns contrariam o ensino da regra do octeto [6], pelo menos na parte inicial de um curso de Química. Historicamente os gases “inertes” tiveram um papel muito activo na formação deste conceito; não eram reactivos, o que se atribuía à sua configuração electrónica, com o octeto exterior de electrões. O facto de se saber agora que, de facto, alguns gases raros formam compostos estáveis retira, em parte, uma razão histórica da regra.

O número de excepções existente, desde os simples BeCl_2 e AlCl_3 (que se podem explicar razoavelmente) até aos mais complicados ICl_3 (com 10 electrões exteriores em volta do átomo central) e SF_6 (com 12 electrões), são bastantes, para que a regra do octeto não seja ensinada com grande relevância [7].

A regra do octeto leva-nos a escrever a estrutura do oxigénio incorrectamente, quando o poderíamos escrever como um dirradical, com sete electrões em volta de cada átomo de oxigénio.

Aparecem ainda outros problemas quando se pretende escrever as estruturas de Lewis para NO_3^- e NO_2^- , prestando atenção à regra do octeto. Aqui torna-se imperativa a introdução do conceito de ressonância (figura 1)

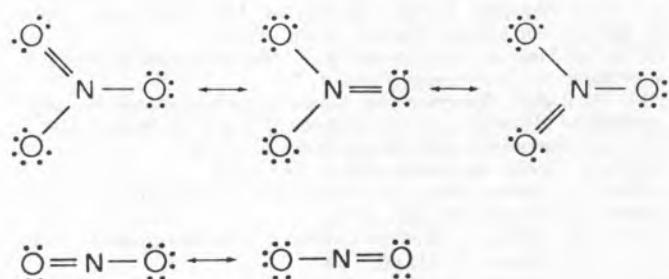


Fig. 1

o que não seria necessário no caso de não se prestar atenção àquela regra (figura 2). O facto destas últimas estruturas não reflectirem o carácter parcial duplo da ligação N-O é de menor importância, dado que o conceito de ligação dupla e simples nem sempre se reflecte na forma de escrever as ligações [8].

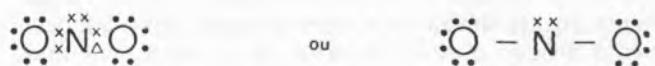
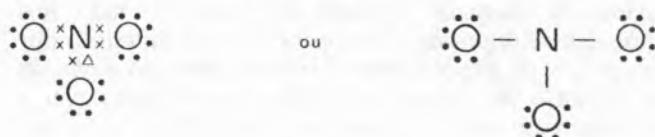


Fig. 2

A experiência mostra-nos que a regra do octeto se torna confusa para os alunos, particularmente quando se começa a falar das excepções e dos ajustamentos necessários através da ressonância.

Considera-se que a regra do octeto foi uma regra prática da Química durante algum tempo, mas que é agora desnecessária e confusa para a maior parte dos alunos.

Sugere-se que ela seja mencionada no seu contexto histórico e apenas depois dos alunos terem adquirido alguns conhecimentos mais profundos sobre ligações químicas.

1 — Kossel, W., *Ann. Phys.* 49, 229 (1916).

2 — Lewis, G.N., *J. Amer. Chem. Soc.* 38, 762 (1916).

3 — Russel, J.B., *Química Geral*, McGraw-Hill do Brasil, 1982.

4 — Mahan, B.H., *Química — Um Curso Universitário*, Edgard Blücher, São Paulo, 1984.

5 — Brescia, F.; Arents, J.; Meislich, H.; Turk, J., *Fundamentals of Chemistry*, Academic Press, 1980.

6 — McClellan, A.L., *Guia do Professor para Química — Uma Ciência Experimental*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1984.

7 — Snadden, R.B., *Education in Chemistry*, 81 (1987).

8 — Sandström, J., *Endeavour*, 37.111 (1984).

Segurança

Coordenação de Maria João Marcelo Curto^a

Trimetilamina e soluções

A trimetilamina é um gás incolor de cheiro persistente a peixe, p.e. 3° C, comercializado em cilindros na forma liquefeita, ou sob a forma de soluções em água ou etanol.

É extremamente inflamável, e irrita os olhos, a pele e o aparelho respiratório. Evitar inalar o vapor e o contacto com os olhos e a pele.

Efeitos tóxicos: O vapor irrita as mucosas e o aparelho respiratório e, quando em concentrações elevadas, pode afectar o sistema nervoso. O vapor e as soluções irritam os olhos. As soluções podem provocar irritação da pele. Presume-se ser venenoso por ingestão.

Perigo de incêndio: Gás — Limites de explosividade: 2,0-11,6%; temperatura de auto-ignição: 190° C. Sendo o gás fornecido num cilindro, qualquer incêndio pode ser reduzido se for possível fechar a respectiva válvula; sempre que possível os cilindros devem ser removidos de áreas onde se tenha declarado incêndio. Soluções em água ou etanol — Extintores: spray, espuma, pó químico seco, neve carbónica ou líquido vaporizante.

Eliminação de resíduos: Excesso de gás ou fuga de um cilindro podem ser removidos por passagem através de uma torre com circulação de água, numa hote com boa tiragem. As soluções podem ser deitadas fora, diluindo com muita água corrente.

Ácido clorídrico

O ácido clorídrico é um líquido fumante, incolor, de cheiro pungente, miscível com a água, geralmente comercializado nas concentrações de 32% ou 36%.

O vapor é nocivo e o líquido provoca queimaduras. Evitar inalar o vapor e o contacto com os olhos e a pele. VLT (como HCl) 5 ppm (7 mg m⁻³).

Efeitos tóxicos: O vapor irrita o aparelho respiratório e afecta gravemente os olhos. Tanto o líquido como o vapor podem causar queimaduras. A ingestão do líquido provoca queimaduras e lesões internas muito graves.

Eliminação de resíduos: Manter as pessoas afastadas do local afectado. Usar luvas e máscara respiratória. Deitar sobre o local do derrame uma quantidade grande de carbonato de sódio e lavar cuidadosamente com água. Deitar fora, diluindo com muita água corrente.

Trietilamina

A trietilamina é um líquido incolor de cheiro amoniacal forte, p.e. 89° C, miscível com a água.

É extremamente inflamável e irrita os olhos, a pele e o aparelho respiratório. Evitar inalar o vapor e o contacto do líquido com os olhos e a pele. VLT 25 ppm (100 mg m⁻³).

Efeitos tóxicos: O vapor irrita os olhos e o aparelho respiratório. O líquido provoca irritação nos olhos. Presume-se ser irritante e venenoso quando ingerido.

Reacções perigosas: O complexo de trietilamina com tetróxido de azoto, na presença de excesso deste último, explode abaixo de 0° C quando livre de solvente.

Perigo de incêndio: Ponto de fulgor: -7° C; limites de explosividade: 1,2-8,0%. Extintores: spray de água, pó químico seco, neve carbónica ou líquido vaporizante.

Eliminação de resíduos: Eliminar todas as fontes de ignição. Manter todas as pessoas afastadas do local afectado. Usar máscara respiratória e luvas. Lavar com muita água e deitar fora, diluindo com muita água corrente. Ventilar a zona afectada para evaporar resíduos do líquido e remover o vapor.

Piridina

A piridina é um líquido incolor de cheiro penetrante, p.e. 115° C, miscível com a água.

É um líquido muito inflamável, que liberta vapor tóxico, e irrita os olhos, a pele e o aparelhos respiratório. Evitar inalar o vapor e o contacto do líquido com os olhos e a pele. VLT 5 ppm (15 mg m⁻³).

Efeitos tóxicos: O vapor irrita o aparelho respiratório e pode causar dores de cabeça, náuseas, tonturas e vômitos. O vapor e o líquido irritam os olhos e podem causar conjuntivite. O líquido irrita a pele podendo provocar dermatites. Quando ingerida, a piridina afecta o sistema nervoso central; em grande quantidade como veneno cardíaco.

Reacções perigosas: O anidrido maleico decompõe exotermicamente na presença de piridina. O sólido resultante da reacção de piridina com BrF₃ entra em ignição quando seco. O complexo de piridina com trióxido de crómio é instável. A piridina entra em incandescência quando em contacto com fluor e reage violentamente com tetróxido de azoto.

Perigo de incêndio: Ponto de fulgor: 20° C; limites de explosividade 1,8-12,4%; temperatura de auto-ignição: 482° C. Extintores: spray de água, espuma, pó químico seco, neve carbónica ou líquido vaporizante.

Eliminação de resíduos: Eliminar todas as possíveis fontes de ignição. Manter as pessoas afastadas do local afectado. Usar luvas e máscara respiratória. Lavar com

^a Departamento de Tecnologia de Indústria Química (LNETI), Estrada das Palmeiras, 2745, Queluz.

muita água e deitar fora, diluindo com muita água corrente. Ventilar muito bem a zona afectada para evaporar o líquido restante e remover o vapor.

Hidróxido de sódio (soda cáustica)

O hidróxido de sódio é um sólido branco, que se apresenta sob a forma de flocos, pó ou em pastilhas, solúvel em água.

Provoca queimaduras muito graves. Evitar o contacto com os olhos e a pele. VLT 2 mg m⁻³.

Efeitos tóxicos: O sólido e as suas soluções concentradas provocam queimaduras muito graves nos olhos e na pele. Soluções de concentração tão baixa como 2,5 N podem causar lesões graves nos olhos. A ingestão provoca irritação e lesões internas de muita gravidade.

Reacções perigosas: O hidróxido de sódio dá reacções muito exotérmicas com a água. Reage vigorosamente com misturas de clorofórmio/metanol.

Eliminação de resíduos: Usar viseira ou óculos e luvas. Deitar o resíduo num balde de plástico e adicionar, aos poucos e misturando bem, a um grande volume de água. Após dissolução completa, deitar fora, diluindo com muita água corrente. Lavar o local afectado com água.

Hidreto de alumínio e lítio (tetra-hidroaluminato de lítio)

O hidreto de alumínio e lítio, $AlLiH_4$, apresenta-se sob a forma de um pó microcristalino ou grânulos, decompondo acima dos 125° C e que reage rapidamente com água com evolução de hidrogénio.

O contacto com a água provoca a libertação de gás extremamente inflamável. Irrita os olhos e a pele. Evitar o contacto com os olhos e a pele e manter os recipientes bem fechados, em local seco.

Efeitos tóxicos: A reacção com água produz hidróxido de lítio corrosivo que irrita a pele e os olhos.

Reacções perigosas: Pode entrar em ignição quando esmagado num almofariz; a utilização na secagem de éter bis(2-metoxietílico) pode provocar explosões; encontram-se descritas reacções explosivas com eterato de trifluoreto de boro, peróxido de dibenzoílo, 1,2-dimetoxietano, acetato de etilo, entre outros. Podem ocorrer reacções violentas com piridina e com tetra-hidrofurano.

Perigo de incêndio: O perigo de incêndio resulta em geral do contacto com pequenas quantidades de água. Não usar extintores, a não ser que haja disponível um extintor especial da classe D, para fogos envolvendo metais e hidretos de metais. O incêndio pode ser abafado com areia (ver em eliminação de resíduos).

Eliminação de resíduos: Manter todas as pessoas afastadas do local. Eliminar todas as fontes de ignição. Usar óculos ou viseira e luvas. Cobrir a zona afectada com carbonato de sódio, meter num balde seco, transportar para um local seguro no exterior e adicionar, aos poucos, um grande excesso de propan-2-ol seco. Deixar em repouso durante 24 horas e deitar fora, diluindo com muita água corrente.

Nitrometano

O nitrometano, CH_3NO_2 , é um líquido incolor oleoso de cheiro desagradável, solúvel em éter dietílico, etanol e acetona, e ligeiramente solúvel em água (até 10%),

p.e. 101° C, podendo formar compostos sensíveis ao choque com algumas aminas e álcalis. O líquido é inflamável e liberta vapor tóxico. Evitar inalar o vapor e o contacto com os olhos e a pele. VLT 100 ppm (250 mg m⁻³).

Efeitos tóxicos: O vapor de nitrometano, quando inalado, é irritante, provocando tosse e falta de ar; a inalação de concentrações elevadas provoca dores de cabeça, náuseas, diarreia, descoordenação muscular e narcose. A inalação repetida de níveis superiores a 1000 ppm pode dar origem a lesões renais. A ingestão de nitrometano causa irritação do tracto gastrointestinal e lesões internas. O contacto com os olhos provoca irritação e em contacto com a pele pode causar irritação e dermatites.

Reacções perigosas: O nitrometano é estável em condições normais, mas pode detonar por impacto ou por acção do calor. O risco de detonação é aumentado por contacto com ácidos, bases e aminas. Podem dar-se reacções violentas ou explosivas com ácido nítrico, crivos moleculares, formaldeído, hidreto de sódio, hidrocarbonetos, hipoclorito de cálcio, óxidos metálicos, percloratos, reagentes de Grignard. As misturas com clorofórmio, bromofórmio ou acetona podem detonar.

Perigo de incêndio: Ponto de fulgor: 35° C. Temperatura de auto-ignição: 418° C. Extintores: espuma, pó químico seco, neve carbónica ou líquido vaporizante. Atenção: o calor pode provocar a detonação do nitrometano.

Eliminação de resíduos: Manter todas as pessoas afastadas do local. Eliminar todas as fontes de ignição e utilizar óculos, luvas e máscara respiratória. Aplicar um agente dispersante não inflamável e trabalhar a mistura até obter uma emulsão. Deitar fora, diluindo com muita água corrente. Alternativamente, absorver em areia, colocar em baldes e transportar para o exterior, para ser enterrado ou incinerado, ou para evaporação atmosférica em local seguro. Ventilar muito bem toda a zona afectada e lavar com água e sabão ou detergente.

Cloreto de hidrogénio

O cloreto de hidrogénio é um gás incolor, fumante na presença da humidade atmosférica, de cheiro sufocante, p.e. -85° C, que dissolve rapidamente em água formando o ácido clorídrico.

É uma substância corrosiva e irritante, tóxica por inalação e que irrita os olhos, a pele e o aparelho respiratório. Evitar a inalação do gás e o contacto com os olhos e a pele. VLT 5 ppm (7 mg m⁻³).

Efeitos tóxicos: O gás é extremamente irritante para os olhos e aparelho respiratório. Irrita a pele e pode provocar queimaduras graves nos olhos e na pele.

Reacções perigosas: O cloreto de hidrogénio reage violentamente com alumínio e entra em ignição na presença de fluor. Provoca reacções perigosas com alguns acetiletos.

Eliminação de resíduos: Um excesso do gás ou uma fuga de um cilindro do gás comprimido devem ser ventilados lentamente através de uma torre de lavagem com circulação de água, colocada numa hote com boa tiragem.

Peróxido de hidrogénio (água oxigenada)

O peróxido de hidrogénio, H_2O_2 , é um líquido incolor com um cheiro característico, miscível com a água, solúvel em éter dietílico e insolúvel em éter de petróleo, de p.e. $152^\circ C$, que é decomposto por muitos solventes orgânicos. Normalmente é utilizado sob a forma de soluções aquosas 3-90% estabilizadas por acetanilida. O peróxido de hidrogénio provoca queimaduras. O contacto com materiais combustíveis pode causar incêndios. Evitar o contacto com os olhos e a pele. VLT 1 ppm ($1,5 \text{ mg m}^{-3}$).

Efeitos tóxicos: A inalação do vapor, especialmente em concentrações elevadas, pode causar irritação e inflamação do nariz, garganta e aparelho respiratório. O contacto do líquido com os olhos provoca picadas e lacrimação, podendo resultar em ulceração da córnea. O contacto da pele com o líquido concentrado pode causar manchas brancas temporárias, queimaduras e aparecimento de bolhas. A ingestão do líquido provoca irritação do tracto gastrointestinal e a libertação rápida de oxigénio que origina a distensão do esfago ou do estômago, podendo causar lesões e hemorragias internas graves.

Reacções perigosas: O peróxido de hidrogénio é um agente oxidante muito forte que envolve o risco de explosão. Decompõe exotermicamente para dar oxigénio

e água, sendo a decomposição catalisada por muitos tipos de impurezas, particularmente metais como o paládio, a prata, o cobre, o crómio e o manganês. A energia libertada pela decomposição catalítica de uma solução de 65% de peróxido de hidrogénio é suficiente para provocar a evaporação de toda a água, permitindo a ignição de substâncias combustíveis. As substâncias celulósicas podem entrar em ignição espontânea quando em presença de um solução peróxido de hidrogénio a 90%. Os solventes miscíveis com peróxido de hidrogénio, como o etanol e a acetona, podem detonar quando misturados com soluções de peróxido de hidrogénio em concentração superior a 30%. Encontram-se descritas muitas reacções violentas ou explosivas envolvendo peróxido de hidrogénio e acetaldeído, acetona, acetato de vinilo, ácido acético, ácidos carbóxicos, ácido sulfúrico, álcoois, bases azotadas, carvão activado, cetena, cetonas e ácido nítrico, éter dietílico, fósforo, madeira, metais, óxidos metálicos, pentóxido de fósforo, e numerosos compostos orgânicos.

Perigo de incêndio: Os incêndios envolvendo peróxido de hidrogénio são melhor controlados pelo uso de grandes volumes de água.

Eliminação de resíduos: Manter todas as pessoas afastadas da zona afectada. Usar protecção facial e luvas. Lavar com água e deitar fora, diluindo com muita água corrente.

Amiguinhos, cá estamos de novo para vos apresentar a terceira dose do nosso/vosso novo léxico científico.

Tem sido uma recolha muito afanosa, mas a vida é assim ... cheia de trabalho. O vosso apoio tem sido a razão de ser, para continuar a dotar a Química Portuguesa de mais um instrumento de trabalho. Bem hajam... e meditem muito.

Novo léxico científico — 3.^a dose

pelo Digníssimo Professor Florêncio Vesúvio (1), humanista e crítico científico

Radicais — Pessoas intolerantes

"Trap" de radicais — Quando os primeiros vão dentro dentro

Radicais livres — Quando os segundos são soltos

Molécula reduzida — Molécula tornada mais pequena

Composição molecular — Conjunto de moléculas atreladas umas às outras

Conservação de massa — Não permitir que eles "gagem" a carteira

Balço de massas — Acto de pendular a carteira

Propriedades críticas — Tendência manifestada por certas pessoas para a crítica

Libertação de gases — ... Só nos sanitários

Termoquímica — Química feita com termómetros

Fotoquímica — Química feita com fotos

Ponto triplo — Local onde se escreve, 1×2

Conservação da Energia — Acto de evitar esforços violentos em todas as ocasiões

Pressão reduzida

Professor (na aula teórico-prática) — Fez os cálculos à pressão reduzida?

Aluno — Não Sôr Professor

Professor — Mas eu não o alertei no início da aula para esse pormenor?

Aluno — Alertou ... mas desse modo o lápis não escreve

Prova

Diz o supervisor ao supervisionado — E dá esse produto? ... como o pode provar?

O supervisionado pegou no copo com o produto da reacção, bebeu tudo e exclamou antes de cair — Assim Professorr... Professorr...

Ponto de ebulição

Professor (no laboratório) — Já chegou ao ponto de ebulição?

Aluno — Não Setôr ..., ainda pode bater mais

Evacuar a sala

Cientista (no gabinete) — Sempre evacuou a sala desses ranhosos dos estudantes para podermos dar a conferência?

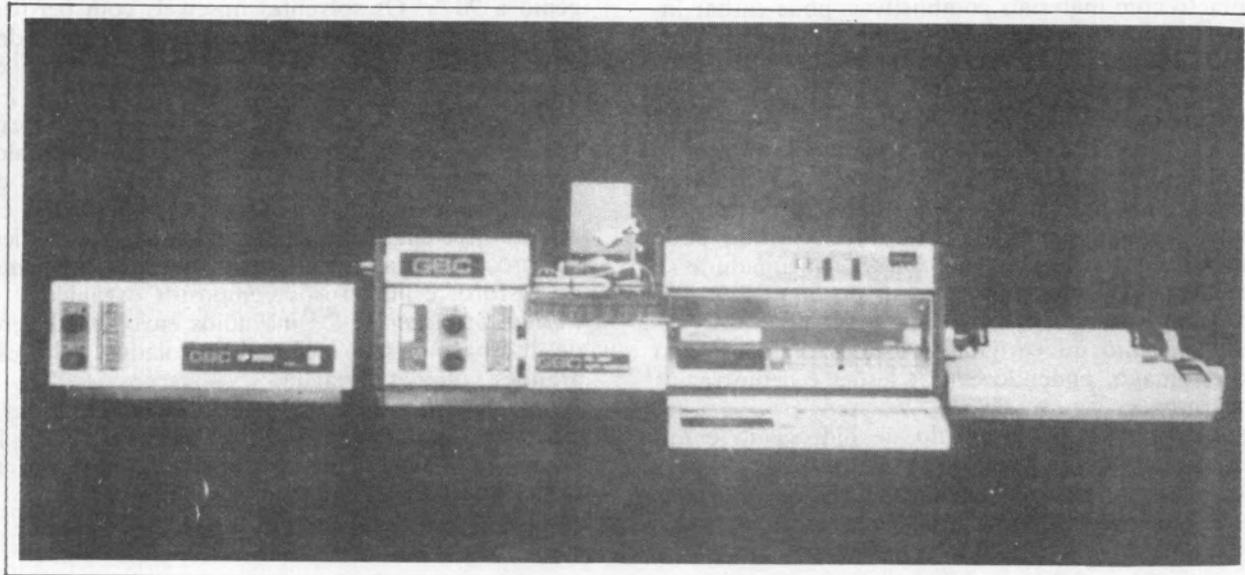
Subalterno — Sim Professor, já fizemos o vácuo até 10^{-1} torr ... a sala não veda muito bem. Agora é só tirar os cadáveres.

Adeus ... e meditem muito!

(1) abreviado D. Professor Florêncio Vesúvio

GBC

ABSORÇÃO ATÓMICA



AGORA EM PORTUGAL

ABSORÇÃO ATÓMICA CHAMA-SE:

GBC

EXCELENTES EQUIPAMENTOS

AOS MELHORES PREÇOS DO MERCADO

(2 sistemas vendidos nos primeiros 3 meses de promoção)

PEÇA-NOS UMA OFERTA.

DISTRIBUIDORES EM PORTUGAL:



DIAS DE SOUSA LDA

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 12 - 1.º D.
2625 PÓVOA DE STA. IRIA
TEL. (01) 259 23 16 - 259 24 09
TLX. 43926 DISO P

PRAÇA PEDRO NUNES, 94
4000 PORTO
TEL. (02) 93 14 99 - 93 38 09
TLX. 26250 NSC P

Energia de activação? Qual?

Lídia M.P.C. Albuquerque^a
Raquel M.C. Gonçalves^a

1. Introdução

Todo o cinético — todo o químico — afirmará, sem qualquer relutância: «É fundamental conhecer o significado de *Energia de Activação*».

Mas o que é *Energia de Activação*?

Aqui, um aluno, se interpelado, titubeará — e, provavelmente, também o professor.

Uma primeira dificuldade na resposta resulta de, ao termo genérico *Energia de Activação*, corresponderem vários conceitos, muitas vezes inter-relacionados mas numericamente diferentes, como sejam a Energia de Activação de Arrhenius, E_a , a Barreira de Energia Potencial, V_B , a Energia (Interna) de Activação do Ponto Zero, Δ^*U_0 , a Energia Interna de Activação, Δ^*H_T , e a Entalpia de Activação, Δ^*H_T , entre outras; uma segunda, surge, ainda, na própria interpretação de cada um destes conceitos¹.

A índole essencialmente empírica ou teórica, a consideração ou não das energias vibracionais das moléculas reagentes e do complexo activado no zero absoluto e a distribuição estatística das energias em função da temperatura são os factores que diferenciam as definições das várias energias de activação.

A Cinética Química é um domínio científico em contínuo e rápido desenvolvimento. Ainda recentemente foi divulgado o papel relevante da *Energia de Activação* na relação estrutura molecular — reactividade química².

O presente trabalho pretende mostrar a evolução do significado e da interpretação do termo genérico *Energia de Activação*.

2. Energias de Activação

Altura da Barreira de Energia Potencial — V_B

Se se considerarem os níveis energéticos correspondentes às mais estáveis configurações do complexo activado e dos reagentes, tendo em conta que o estado de transição se encontra no ponto mais elevado do percurso de energia mínima que transforma reagentes em produtos da reacção, a sua diferença representa o valor de V_B — *Altura da Barreira de Energia Potencial*.

Deste modo foram excluídas na definição de V_B as energias vibracionais, presentes mesmo no zero absoluto ($\sum_{n,h} \nu_n/2$), assim como outras, a temperaturas superiores.

V_B é obtido por cálculos quânticos.

Energia de Activação do Ponto Zero — Δ^*U_0

De acordo com a equação fundamental da Teoria do Estado de Transição:

$$k = \frac{k_B T}{h} \chi \frac{Q^*}{Q_r} e^{-\Delta^*U_0/RT} \quad (1)$$

onde k é a constante de velocidade ou velocidade específica, k_B , h e R , as constantes de Boltzmann, Planck e dos gases, respectivamente, χ , o coeficiente de transmissão e Q^* e Q_r , as funções de partição do complexo activado e dos reagentes, Δ^*U_0 — *Energia (Interna) de Activação do Ponto Zero* representa a diferença na energia potencial adicionada da energia do ponto zero, de carácter vibracional uma vez que energias translacionais e rotacionais são nulas a 0 K, do complexo activado em relação aos reagentes.

Consequentemente, Δ^*U_0 deve ser designado por *Altura da Barreira corrigida para as Energias do Ponto Zero*.

Energia Interna de Activação — Δ^*U_T

Admitindo uma distribuição energética de Boltzmann com a temperatura:

$$U_T^0 = U_0^0 + \int_0^T C_V dT \quad (2)$$

onde U_T^0 é a energia interna à temperatura T e C_V é a capacidade calorífica a volume constante, quer para os reagentes quer para o complexo activado, tendo sido excluído, para esta última espécie, o grau de liberdade translacional correspondente ao movimento ao longo da coordenada reaccional, a diferença entre U_T^0 para o complexo activado e para os reagentes representa Δ^*U_T — *Energia Interna de Activação* à temperatura T .

Entalpia de Activação — Δ^*H_T

A entalpia relaciona-se com a energia interna pela conhecida expressão termodinâmica:

$$H = U + pV \quad (3)$$

Consequentemente, a obtenção de Δ^*H_T — *Entalpia de Activação* pode fazer-se adicionando $\Delta(pV)$, diferença entre valores para o complexo activado e para os reagentes, a Δ^*U_T .

Em reacções em fase gasosa, em condições ideais:

- (i) unimoleculares: $\Delta^*H_T = \Delta^*U_T$
- (ii) bimoleculares: $\Delta^*H_T = \Delta^*U_T - RT$
- (iii) termoleculares: $\Delta^*H_T = \Delta^*U_T - 2RT$

Em reacções em fase condensada, pV é desprezável e $\Delta^*H_T = \Delta^*U_T$.

^a CECUL — Instituto Bento da Rocha Cabral, 14, 1200 Lisboa.

2.1. Energia de Activação de Arrhenius — E_A

De todas as energias de activação mencionadas, a de uso mais comum é E_A — *Energia de Activação de Arrhenius*, a qual, por esse facto, nos merece referência especial.

E_A é uma quantidade empírica definida através da equação de Arrhenius:

$$k = A \exp(-E_A/RT) \quad (4)$$

onde A é designado por “factor pré-exponencial”. E_A são ambas independentes da temperatura e determinam-se através do gráfico de variação de $\ln k$ com $1/T$.

A sua introdução na Cinética Química, tal como o nome indica, deve-se a Arrhenius, em 1889³. Este investigador, basicamente um electroquímico, no sentido de credibilizar a sua Teoria da Dissociação Electrolítica, efectuou estudos cinéticos, incluindo efeitos salinos, de reacções que envolviam, na maioria, electrólitos⁴. Deve-se, ainda, àquele investigador a ideia fundamentada da substituição do termo “constante de velocidade” por “velocidade específica”, por ser k sensível a um grande número de variáveis, controvérsia que se veio a estender até aos dias de hoje. Arrhenius verificou que as amplitudes dos efeitos de temperatura na velocidade das reacções eram demasiado grandes para poderem ser interpretadas com base na variação das energias moleculares translacionais ou da viscosidade do meio com a temperatura. Explicou, então, o fenómeno admitindo a existência de moléculas reagentes de dois tipos, “activas” e “passivas”, em equilíbrio, o qual era descrito pela equação de van't Hoff. A quantidade das primeiras aumentaria rapidamente com a temperatura, embora o seu número fosse sempre muito inferior ao das segundas. k seria proporcional à fracção das moléculas reagentes na forma “activa”, sendo E_A interpretado como a diferença de entalpia entre aqueles dois tipos de moléculas reagentes.

É curioso notar que, enquanto as moléculas “passivas” determinavam, em geral, as propriedades físicas e químicas do sistema, as moléculas “activas” determinavam as propriedades reaccionais.

Estudos anteriores de Hood tinham já sugerido a linearidade de $(d \ln k/dT)_p$ com T^{-2} e posteriores de Bodenstein verificaram ser $\log k$ função linear de T^{-1} ⁴. Apesar disso, só cerca de quinze anos após a sua formulação a equação de Arrhenius começou a ser aceite. O desenvolvimento independente da Teoria das Colisões, nos anos vinte, não foi alheio a este processo, uma vez que a sua equação fundamental envolve uma relação $k-T$ análoga à proposta empiricamente por Arrhenius. Por outro lado, o conceito de Arrhenius de “estado activado” das moléculas foi o precursor das modernas teorias das velocidades das reacções, a Teoria do Estado de Transição, em particular. De facto, a formulação desta teoria requer a criação de um “complexo activado” no estado de transição, e a existência de um equilíbrio entre as moléculas dos estados inicial e de transição.

O avanço tecnológico, que permitiu uma maior precisão nos valores de k , mostrou nas últimas décadas a não generalidade da equação de Arrhenius. No entanto, mesmo quando a sua aplicabilidade é duvidosa, o seu uso é ainda muito vasto: sobre resultados de fraca precisão, em pequenos intervalos de temperatura e com

o intuito de obter valores interpolados, para além, evidentemente, do interesse pedagógico-didáctico da sua introdução na história da Cinética Química.

Têm sido sugeridas algumas razões para justificar a não adaptação da equação de Arrhenius a resultados experimentais, nomeadamente, a presença de catalisadores e de mecanismos concorrentes, a acção relevante de solventes em reacções em solução, o controlo cinético por difusão, o efeito de túnel em reacções de transferência protónica, etc. Desenvolvimentos da equação de Arrhenius, principalmente no sentido da sua aplicação a intervalos de temperatura alargados têm sido propostos, como seja admitir A proporcional a uma potência m de T :

$$k = A' T^m \exp(-E_A/RT) \quad (5)$$

onde o parâmetro A' é independente da temperatura. Em reacções bimoleculares em fase gasosa, se se considerar, por hipótese, que as velocidades relativas das moléculas reagentes têm uma distribuição de Maxwell-Boltzmann, a energia de activação de Arrhenius é a diferença entre duas quantidades estatísticas, a energia média das colisões eficazes e a energia média de todas as moléculas, que de um modo geral é dependente da temperatura⁴⁻⁶⁻⁷.

Neste caso,

$$E_A = \Delta^* U_T + R \left\{ T - \left[\frac{d \ln \chi}{d(1/T)} \right]_p \right\} \quad (6)$$

e, se χ for unitário ou, pelo menos, independente da temperatura, a equação anterior reduz-se a:

$$E_A = \Delta^* U_T + RT \quad (7)$$

A evolução do significado do termo *Energia de Activação* justifica, a nosso ver, a introdução em Cinética da *Energia de Activação Experimental* — E_{exp} , já definida por Laidler⁵:

$$E_{exp} = -R \left[\frac{d \ln k}{d(1/T)} \right]_p \quad (8)$$

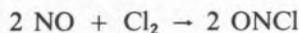
e para a qual não é imposta uma variação particular com a temperatura.

Na Tabela 1 apresentam-se algumas das equações utilizadas para descrever a dependência da velocidade específica da temperatura⁸, assim como a relação de E_{exp} com os parâmetros naquelas incluídos. A sua determinação é usualmente feita por um tratamento analítico que recorre ao método dos mínimos quadrados. Como se pode ver na referida tabela, apenas em condições particulares $E_{exp} \equiv E_A$.

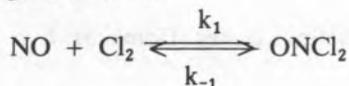
$\ln k = f(T)$	E_{exp}
$\ln k = A + B/T$	$-RB (\equiv E_A)$
$\ln k = A + B/T + C \ln T$	$-R(B + CT)$
$\ln k = A + C \ln T + DT$	$-R/(CT + DT^2)$
$\ln k = A + B/T + C \ln T + DT$	$-R(B + CT + DT^2)$
$\ln k = A + BT^C$	$RBCT^{C+1}$

Tabela 1.
Variação da velocidade específica com a temperatura; E_{exp}

A introdução de E_{exp} permite evitar ambiguidades na definição de E_A , utilizando-se a designação Energia de Activação de Arrhenius exclusivamente para uma quantidade termodinâmica invariável com T. A interpretação de E_A segundo Arrhenius só tem sentido para processos elementares. Um exemplo característico é o da reacção:



em fase gasosa, que apresenta para E_A um valor negativo, o que seria inconcebível admitindo-a de passo único⁹. O mecanismo proposto para esta reacção assume a seguinte forma:



A aplicação do Princípio do Estado Estacionário ao intermediário ONCl_2 e na situação extrema de $k_{-1} \gg k_2$, a reacção mostra-se de 3.^a ordem. Considerando variação linear de $\ln k$ com T^{-1} para todas as reacções parciais, obtém-se:

$$E_A = -R \left[\frac{d \ln (k_1 k_2 / k_{-1})}{d (1/T)} \right]_p = E_1 + E_2 - E_{-1}$$

onde E_1 , E_2 e E_{-1} são as energias de tipo arrheniano envolvidas nos passos a que correspondem, respectivamente, k_1 , k_2 e k_{-1} .

O valor negativo de E_A pode, então, ser facilmente explicado:

$$E_{-1} > E_1 + E_2$$

Outros exemplos são possíveis, reacções em cadeia, de catálise heterogénea e de recombinação atómica, para as quais E_A apresenta expressões complexas em termos das energias dos processos elementares.

3. Exemplo

A reacção em fase gasosa



foi estudada experimental e teoricamente. Na Figura 1 apresenta-se uma comparação entre as diferentes energias de activação, atrás definidas, para esta reacção*. À esquerda representaram-se níveis energéticos respeitantes aos reagentes e, à direita, respeitantes ao complexo activado.

4. Comentário final

Na Cinética Química é possível discernir entre duas linhas de desenvolvimento: uma, de índole essencialmente empírica e, outra, teórica¹⁰. A lei de velocidade de uma reacção bem como a equação de variação da velocidade específica com a temperatura formulada por Arrhenius, e consequentemente E_A , são de carácter empírico, isto é, de verificação estritamente experimental.

Por outro lado, as equações resultantes da Teoria das Colisões e da Teoria do Estado de Transição inserem-se na segunda linha de desenvolvimento. Assim,

Δ^*U_0 , Δ^*U_T e Δ^*H_T são de carácter teórico. Conceitos básicos, como os generalizados sob a designação de *Energia de Activação*, têm definições precisas e, embora muitas vezes interrelacionados, são numericamente distintos.

Em resumo, para uma reacção elementar podem estabelecer-se as seguintes igualdades:

$$\Delta^*U_0 = V_B + \Delta \left(\sum_n h\nu_n / 2 \right)$$

$$\Delta^*U_T = \Delta^*U_0 + \Delta \left(\int_0^T C_v dT \right)$$

$$\Delta^*H_T = \Delta^*U_T + \Delta(pV)$$

$$E_A = \Delta^*U_T + R \left\{ T - \left[\frac{d \ln \chi}{d (1/T)} \right]_p \right\}^*$$

* E_A segundo Logan⁴.

onde as variações Δ representam as diferenças entre as funções expressas para o complexo activado e para os reagentes.

É frequente a apresentação, em livros de texto elementares, de diagramas de energia em função de uma coordenada reaccional em que $E_A \equiv \Delta^*U_0 \equiv V_B$. Esta simplificação pode conduzir a incorrecções na interpretação daqueles conceitos. O problema ainda se torna mais complicado quando face a reacções extremamente rápidas e de mecanismo complexo.

Referências

1. P.D. Pacey, J. Chem. Educ., 1981, **58**, 612.
2. S.J. Formosinho, Rev. Port. Quím., 1985, **27**, 427.
3. S. Arrhenius, Z. Physik. Chem., 1889, **4**, 226.
4. S.R. Logan, J. Chem. Educ., 1982, **59**, 279.
5. K.J. Laidler, J. Chem. Educ., 1984, **61**, 494.
6. D.G. Truhlar, J. Chem. Educ., 1978, **55**, 309.
7. S.J. Formosinho, Rev. Port. Quím., 1975, **17**, 268.
8. L. Albuquerque e R. Gonçalves, "Cinética Química", Escolar Ed., Lisboa, 1986.
9. S.R. Logan, Educ. in Chem., 1986, **23**, 148.
10. S.R. Logan, Educ. in Chem., 1984, **21**, 20.

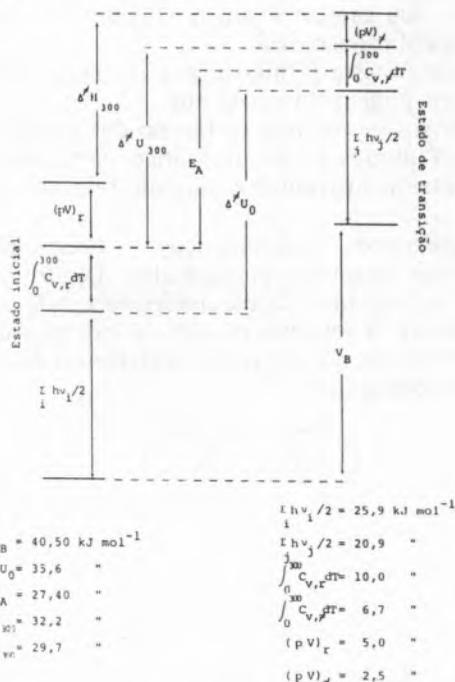


Figura 1. Esquema energético para a reacção: $\text{D} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HD} + \text{H}$

* E_A segundo Logan⁴.

Sedativos ansiolíticos (tranquilizantes)

Emília M.A.P. Barata de Carvalho*

1. Introdução

Várias teorias tentam explicar a patologia química dos distúrbios mentais e emocionais, embora nenhuma tenha a aceitação geral. Uma das mais recentes relaciona tais distúrbios com as aminas cerebrais (serotonina, epinafrina, tiramina e outras), que coordenam e regulam os fenómenos bioquímicos, fisiológicos, psicológicos e clínicos. Segundo Dewhurst, autor desta teoria, tais aminas actuam como estimulantes ou como depressores e os efeitos que produzem são mediados por receptores cerebrais específicos. Qualquer alteração no seu mecanismo normal causará as psicoses funcionais.

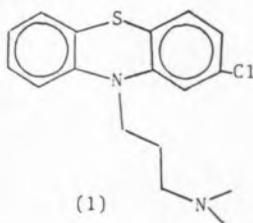
Os medicamentos que modificam o estado psíquico são denominados psicotrópicos ou psicofármacos e incluem drogas que deprimem ou estimulam selectivamente a actividade mental.

As primeiras drogas usadas no tratamento dos distúrbios mentais foram, provavelmente, o álcool e o ópio. Quanto aos psicofármacos, foram a clorpromazina e a reserpina os primeiros a ser usados. A clorpromazina foi utilizada em 1951 por Laborit e colegas para produzirem a "hibernação artificial" e por Delay no tratamento de distúrbios mentais. O aparecimento destes fármacos deu origem a um novo ramo da farmacologia, a psicofarmacologia.

Do ponto de vista farmacológico os medicamentos psicotrópicos podem dividir-se em:

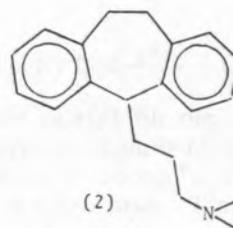
— *Sedativos ansiolíticos* — (grupo das benzodiazepinas e outros) usados como ansiolíticos, sedativos, hipnóticos, anticonvulsivantes e musculo-relaxantes.

— *Antipsicóticos* (neurolépticos) — Produzem calma em doentes altamente conturbados. Usados em tratamentos prolongados de esquizofrenia aguda e crónica. Os derivados fenotiazínicos são um exemplo de fármacos pertencentes a este grupo. O elemento de referência é a clorpromazina (1).



— *Antidepressivos* ("antidepressores") — São usados para restaurar pacientes mentalmente deprimidos. Estão neste grupo, entre outros, os compostos tricíclicos, inibidores de monoamino oxidase (MAO), sais de lítio e estrôncio.

O composto protótipo destes fármacos é a imipramina (2).



— *Psicodislépticos* (alucinogêneos) — Têm escassa aplicação em terapêutica. Produzem psicoses, algumas intensas e têm amplo consumo ilegal (LSD, mescalina, etc.).

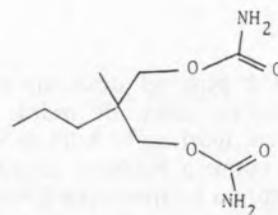
2. Sedativos Ansiolíticos (tranquilizantes)

Entende-se por ansiedade o estado de agitação e perturbação do espírito. As principais formas de ansiedade são a fobia, ataques de pânico, pensamentos obsessivos e estados generalizados de ansiedade constante. A primeira perspectiva para o tratamento da ansiedade surge em 1955 com a introdução do meprobameto (3). Hoje são inúmeros os tranquilizantes usados com esse fim.

Do ponto de vista farmacológico apresentam um conjunto de propriedades comuns a todos os elementos do grupo (acção tranquilizante, mio-relaxante, anticonvulsivante, potencialização do álcool e outros medicamentos).

Do ponto de vista químico podem dividir-se em grupos relativamente homogêneos — carbamatos, piperazinas e benzodiazepinas.

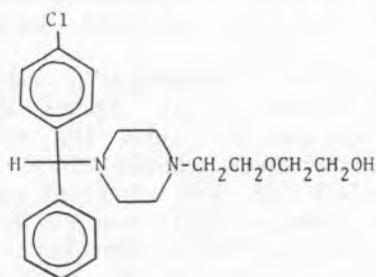
Carbamatos — Um dos mais usados é o meprobameto (3). Utilizado no tratamento de distúrbios psicossomáticos e musculo-esqueléticos, como sedativo e hipnótico.



(Dapax; Tranquil; Probamato)

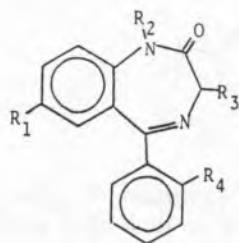
* Faculdade de Farmácia de Lisboa.

Piperazinas — Estes fármacos são usados especialmente como auxiliares no tratamento de ansiedade. Um dos mais usados é a hidroxizina (4).



(4)
(Atarax)

Benzodiazepinas — As benzodiazepinas (5) são, sem dúvida, os psicofármacos mais usados como ansiolíticos, sedativos, anticonvulsivantes, musculo-relaxantes e indutores do sono (quadro 1).



(5)

O desenvolvimento destes fármacos deve-se a L. Sternbach e Reeder que sintetizaram a maioria deles e a Randall que elucidou a sua farmacologia.

A relação estrutura actividade destas drogas pode generalizar-se do seguinte modo: — R₁ deve ser um grupo atractor de electrões. Nenhum outro substituinte poderá estar ligado a qualquer um dos outros carbonos neste anel.

— R₂ e R₃ podem ser variados.

— O grupo fenil é indispensável para a sua actividade, podendo apenas haver halogénios em posição orto.

Nome Oficial	Nome Comercial	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄
Diazepam	Valium; Vicalma	Cl	CH ₃	H	H
Oxazepam	Serenal	Cl	H	OH	H
Lorazepam	Lorenin	Cl	H	OH	Cl
Temazepam	Levanxol	Cl	CH ₃	OH	H
Clorazepam	Rivortil	NO ₂	H	OH	Cl
Flunitrazepam	Rohypnol	NO ₂	CH ₃	H	F

Quadro 1
Algumas das benzodiazepinas mais utilizadas

Acções farmacológicas

Em todos os tranquilizantes se revelam um conjunto de propriedades farmacológicas comuns:

- acção ansiolítica
- acção sedativa-hipnótica
- acção anticonvulsivante

— acção sobre os mediadores químicos do sistema nervoso central (SNC)

— potencialização do álcool, dos barbitúrios e outros medicamentos.

As benzodiazepinas são os fármacos de escolha para tratar a ansiedade. São capazes de substituir o álcool no delírium tremens (síndrome de privação do álcool). Se neste estado for injectado o diazepam, por exemplo, via intravenosa esta sintomatologia desaparece.

Para além do uso como tranquilizantes as benzodiazepinas têm utilidade nas afecções em que há aumento do tónus muscular (tensão muscular acompanhada, em regra, de tensão psíquica).

Aplicam-se ainda no tratamento de espasmos musculares, que se estabelecem à volta duma articulação atingida por um processo inflamatório ou traumático (lesão desportiva), devidos a posições incorrectas durante o sono (torcicolo) e outras alterações dolorosas e incómodas pela limitação dos movimentos.

Metabolismo

Em geral, os tranquilizantes são absorvidos por via digestiva e encontram-se em circulação 20 a 30 minutos depois. A concentração plasmática máxima é atingida algumas horas depois da administração. São metabolizados pelo fígado e eliminados pelos rins e intestino. Suprimida a medicação a quantidade de fármaco no sangue, diminui lentamente no decurso de vários dias. As benzodiazepinas são metabolizadas, in vivo, por hidrólise, hidroxilação, desalquilação, redução e conjugação a compostos quer activos, quer inactivos.

O Diazepam, por exemplo, produz como um dos seus metabolitos o oxazepam igualmente activo.

Acção teratogénica

Embora não se possa incriminar este ou aquele medicamento pelo aparecimento das malformações humanas a prudência exige que uma grávida não deve tomar tranquilizantes.

Toxicidade aguda e sub-aguda

A toxicidade sub-aguda ou crónica não existe. Os tranquilizantes não provocam alterações do estado geral, nem lesões tecidulares, nem perturbações hematopoiéticas, hepáticas ou renais.

O mesmo já não acontece com as intoxicações agudas. Estes fármacos são um meio de fácil acesso dos candidatos ao suicídio. Os sinais de intoxicação variam em função do tempo e da dose absorvida; no entanto, é frequente observar-se um estado geral de embriaguez, vertigens, incoordenação, náuseas e por vezes vômitos seguidos de perdas de consciência, podendo levar ao coma profundo. Em casos mais graves pode ocorrer depressão respiratória e colapso circulatório.

Efeitos secundários

Os efeitos secundários dos tranquilizantes são pouco importantes e relativamente raros. Podem, no entanto, provocar sonolência, fadiga, vertigens e por vezes uma ligeira hipotensão. Estes efeitos surgem, se a dose é excessiva, em doentes sensíveis a estes medicamentos e principalmente em pessoas de idade avançada.

Os tranquilizantes podem reduzir a atenção daí não ser aconselhável a absorção destes medicamentos pelos automobilistas.

Riscos de farmaco-dependência

Talvez porque a tolerância aos tranquilizantes é boa e os efeitos secundários praticamente não existem e ainda devido à sua acção sedativa estes fármacos pres-tam-se a tratamentos longos, tornando-se, neste caso, de elevado risco.

É importante salientar que, quando tomados em doses elevadas e por períodos longos podem provocar tolerância, habituação e dependência física. Daí que a absorção de tranquilizantes deve ser limitada no tempo e intermitente para evitar os riscos de farmaco-dependência.

Mecanismo de acção

Pensa-se que os tranquilizantes possam actuar via catecolaminas, isto porque estes fármacos diminuem o processo de renovação destas aminas endógenas no cérebro.

Estudos farmacológicos detalhados têm sido feitos para elucidar o mecanismo de acção das benzodiazepinas. Estes fármacos imitam e intensificam o efeito do ácido γ -aminobutírico (GABA), neurotransmissor inibidor cuja biosíntese ocorre nos neurónios. As benzodiazepinas facilitam a ligação do GABA aos seus receptores aumentando assim a sua acção inibidora. Em 1977, usando diazepam radioactivo, R.F. Squires e C. Braestrup, na Dinamarca e H. Möhler e T. Okada na Suíça, demonstraram a existência de receptores benzodiazepínicos "binding sites" na membrana neuronal.

Sabe-se hoje que os receptores benzodiazepínicos (BZD) fazem parte de um complexo funcional que pode ser extraído e purificado de membranas sinápticas (Sigel et al., 1983; Schoch e Möhler, 1983). Este complexo apresenta 3 unidades funcionais:

— A primeira unidade — o canal clórico (Cl^-) — está acoplada com a segunda unidade que é constituída pelo receptor GABA-ÉRGICO. Estas duas unidades interagem entre si, após ligação do GABA ao seu receptor, abrindo o canal clórico à passagem de iões Cl^- provocando hiperpolarização da membrana e consequente diminuição da excitabilidade. A 3.ª unidade é o receptor das benzodiazepinas (BZD).

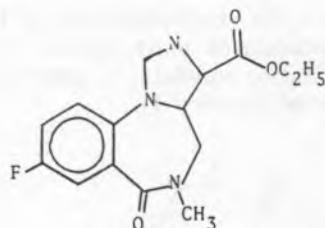
O receptor GABA e o receptor BZD interagem incrementando o transporte dos iões Cl^- através do neurónio post-sináptico aumentando o número de vezes que o canal clórico (1.ª unidade) abre por segundo, isto porque as Benzodiazepinas (BZD) facilitam a ligação do GABA ao seu receptor, favorecendo assim o seu efeito inibidor.

A descoberta dos receptores benzodiazepínicos leva a pensar que existem substâncias endógenas com acções idênticas, pois as benzodiazepinas são compostos sintéticos e é impossível que o cérebro tenha desenvolvido um receptor proteico para elas.

Podem considerar-se três tipos de benzodiazepinas de acordo com os diferentes tipos de receptores:

— *Benzodiazepinas "Agonistas"* (benzodiazepinas clássicas-tranquilizantes). Aumentam a interacção entre o canal clórico e o receptor GABA, daí a sua acção tranquilizante.

— *Benzodiazepinas "Antagonistas"* — Não têm qualquer acção própria, mas são capazes de destruir a acção das agonistas já ligadas. Um exemplo deste grupo é o composto (6) referido pela Roche como o composto RO15-1788. Este composto tem alta afinidade para o receptor BZD, mas não tem qualquer acção farmacológica. Tem um papel importante em terapia, sendo usado para terminar o efeito sedativo das benzodiazepinas em anestesiologia e em casos de doses excessivas de benzodiazepinas agonistas.



(6)

— *Benzodiazepinas "Agonistas de efeito inverso"* — São capazes de deslocar os dois tipos anteriores. A sua acção conduz à diminuição da ligação GABA-R e canal clórico aumentando a excitabilidade do neurónio, daí o efeito proconvulsivante destas drogas.

Actualmente investigadores interessam-se por moléculas benzodiazepínicas "agonistas parciais", as quais permitam separar os efeitos clássicos das benzodiazepinas, a fim de obter moléculas realmente ansiolíticas sem efeito sedativo ou moléculas anti-convulsivantes igualmente não sedativas.

Experiências em animais indicaram que "agonistas parciais" podem apresentar reduzida dependência fisiológica.

Bibliografia

- Louis S. Goodman, Alfred Gilman, "Bases Farmacológicas de la terapêutica" Nueva Editorial Interamericana 1974.
- Garret J., Osswald W., "Terapêutica Medicamentosa e suas bases farmacológicas" — Manual de Farmacologia e Farmacoterapia, I vol. Porto Ed. 1984.
- Thomas Nogrady, "Medicinal Chemistry: a Biochemical Approach", 1985.
- Andrejus Korolkovas, Joseph H.B., "Química Farmacêutica", Ed. Guanabara S.A., 1982.
- W. Haefele; "Pharmacology of Benzodiazepine Antagonists", Pharmacopsychiatry, 18 (1985) 163-166.
- M. Evrard; "Les Benzodiazepines de la Recherche a la clinique", La Revue du praticien, (1984) 3245-3246.

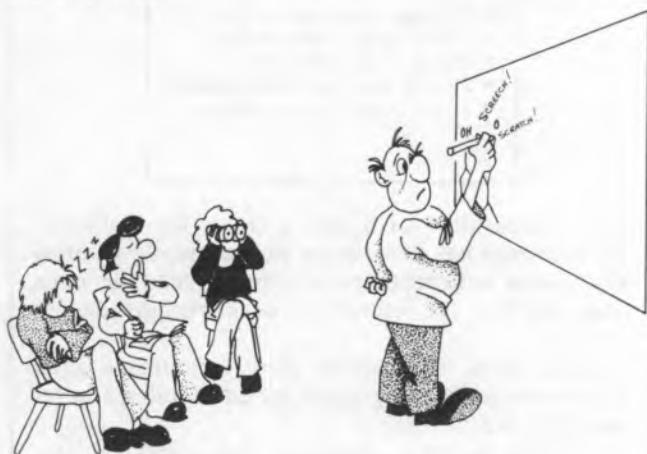
Apresentação de resultados de investigação *

Um manual para químicos que apresentam trabalhos em reuniões internacionais de Química

A tradução deste artigo é apresentada na sequência da publicação feita por duas vezes em *Chemistry International* (n.º 2, 1980; n.º 3, 1981), jornal da IUPAC, bem como da tradução em *L'Actualité Chimique* (n.º 2, 1981) e em *Química Nova* (vol. 6, n.º 1, 1983).

O facto de ser inserida a repetição do artigo no mesmo jornal foi consequência do número de pedidos de cópias recebido (mais de 5000) e atesta o interesse que o artigo despertou.

Agradece-se a *Chemistry International* a autorização dada para traduzir este artigo e publicá-lo no *Boletim da SPQ* para beneficiar aqueles que, em Portugal, se dedicam quer à investigação, quer ao ensino da Química, sobretudo os que não têm acesso fácil a publicações da IUPAC.



Não há nenhum método de comunicação de resultados individuais de investigação que tenha maior impacto e desperte mais atenção do que uma apresentação frente a frente numa reunião de Química de alto nível — seja uma conferência plenária, apresentação de painéis ou apresentação oral de curta duração. Mas, por outro lado, nada pode ser mais aborrecido do que um orador que não tenha organizado o seu material, que mostre diapositivos repletos de dados que mascaram conclusões singificativas e que ultrapasse o tempo disponível falando com uma voz monótona.

O presente artigo é um guia para o auxiliar a apresentar os resultados da sua investigação, as suas conclusões e pontos de vista em reuniões de Química. A maioria das sugestões é simples... talvez óbvia. São apresentadas sugestões para preparar a sua apresentação e ressalta erros que devem ser evitados. Mesmo assim estes erros são repetidos em praticamente todas as reuniões, reduzindo o interesse e compreensão da audiência. A atenção a estes pontos pode tornar o seu trabalho melhor compreendido e reconhecido por químicos através do mundo.

Este guia é baseado em três ensaios escritos por Guy Ourisson, secretário-geral da IUPAC e Professor no Instituto de Química Université Louis Pasteur em Estraburgo, França.

I. APRESENTAÇÃO ORAL

Comece a falar... mas não agora. Acaba de lhe ser dada a palavra pelo presidente da mesa. Espere que o encarregado da projecção tenha preparado os seus diapositivos. Aguarde o momento em que possa falar com segurança e, então, comece.

Comece por referir o que vai falar, em seguida fale sobre isso e, por fim, resume o que foi dito.

Nunca admita que alguém na audiência seja seu fã, conheça o seu trabalho, esteja familiarizado com as suas publicações e esteja à espera que divulgue apenas resultados novos. Coloque sempre o seu assunto numa perspectiva global e explique por que o seleccionou. Descreva sucintamente os seus métodos e resultados e descreva claramente as suas conclusões.

Durante a apresentação, bem como na discussão, fale para a pessoa que está sentada no local mais afastado e não para o presidente da mesa ou para os seus colaboradores sentados nos lugares da frente. Pode pressupor com confiança que este ouvinte no fundo da sala não tem competência na sua área de trabalho mas que espera ser esclarecido. Certifique-se que ele o ouve e que o compreende. Nunca fale para o quadro. Se o auditório estiver equipado com microfones e alto-falantes, evite o ruído estridente provocado pela captação do ruído de um dos alto-falantes pelo microfone: não deixe que o microfone se aproxime do alto-falante mais próximo. Fale sempre perto, mas não colado ao microfone e nunca, nunca toque, mova ou bata nele. Ou então, esqueça o microfone e fale alto.

Se a sua apresentação vai ser acompanhada de tradução simultânea, entre em contacto com o tradutor antes da hora. Dê-lhe um texto relacionado com a conferência ou uma lista com as palavras mais específicas que vai utilizar. Ofereça-lhe antecipadamente a sua ajuda.

Nunca leia um texto: não há nada mais aborrecido. Se não se sentir seguro, use diapositivos com texto, para o auxiliar — e, novamente, não leia textualmente mas limite-se a comentá-los. É muito provável que todos na audiência saibam ler...

Quando ditas em público, certas palavras não ficam na mente de ninguém. Nunca as empregue sem as ter escrito no quadro ou num diapositivo. Nomes estrangeiros podem ser pronunciados de muitas maneiras. Datas

* Tradução de Mariana P.B.A. Pereira, Departamento de Educação da Faculdade de Ciências de Lisboa.

Cumpra aqui à Direcção do Boletim acusar-se como único responsável pela publicação tardia deste texto que o seu tradutor, e muito prezado colaborador, nos entregou em data oportuna. Felizmente que o texto em causa, tal como o bom vinho, ganha com o tempo. Daí que a sua publicação não tenha perdido, pelo contrário, a sua actualidade.

e valores numéricos também devem ser escritos: numa audiência internacional em que se refira "25", alguns podem confundir "fifty two" com "twenty five" ("fünf und zwanzig"). De qualquer modo, é melhor não empregar valores numéricos a não ser que entrem *directamente* na sua discussão. De contrário, quem é que na audiência vai ligar importância ao valor de um ponto de fusão, rotação específica ou deslocamento químico de r.m.n.?

Outro ponto a evitar: nunca empregue um nome sistemático de acordo com a IUPAC, soa mal. Nomes segundo a IUPAC não foram propostos para serem usados desta maneira. Números de passaporte também são sistemáticos, não são ambíguos e são óptimos descritores de indivíduos, mas quem é que vai chamar a sua namorada pelo número do passaporte? E, de qualquer modo, a audiência ficará muito bem informada se disser "esta cetona insaturada..." enquanto se refere à fórmula que está no diapositivo ou no quadro.

Não exceda o tempo disponível. É uma boa ideia fazer uma apresentação prévia para alguns amigos que o possam criticar e que cronometrem o tempo. Diz-se que um novo Presidente ou Primeiro-Ministro tem 100 dias para mostrar o que pode fazer. Um conferencista tem 20 minutos, quando muito. Se a apresentação está marcada para durar 45 minutos, os últimos 25 minutos só serão úteis se conseguiu interessar a audiência nos primeiros 20 minutos. Se for um excelente orador, ninguém vai notar que ultrapassou o limite de tempo de alguns minutos. Mas se balbuciar após o limite, pode ter a certeza que vai antagonizar o orador seguinte, o responsável pela sessão e o resto da audiência. Obedeça automaticamente às luzes de aviso, se em uso, ou use relógios com alarme.

E, agora, algumas palavras sobre setas luminosas que se destinam a mostrar um ponto no diapositivo e em seguida a desaparecer. Uma seta luminosa será mais visível em *qualquer* outra superfície além do écran de projecção; desligue-a quando não estiver em uso. De contrário estará a chamar a atenção da audiência para a parede de sala, para o tecto ou para um vaso de plantas.

Quando chegar ao fim da sua palestra conclua brevemente, de modo claro e *explícito*. A audiência deve saber quando aplaudir ou, pelo menos, quando acordar. Finalmente, se tem de falar em inglês e não domina bem a língua, peça auxílio a um colega de língua inglesa pelo menos para corrigir as palavras-chave que vai usar constantemente durante a palestra.

II. APRESENTAÇÃO DE DIAPOSITIVOS

Os diapositivos são a maneira mais fácil de transmitir informação nas condições de uma apresentação oral. O melhor modo é, provavelmente, o giz e o quadro, mas o seu uso em simpósios requer experiência, espaço amplo no quadro e um tópico apropriado. É insuperável quando é bem feito, mas geralmente não é recomendável.

Os diapositivos são muito valiosos para realçar pontos importantes da sua apresentação oral e para mostrar material que não possa ser explicado com facilidade. Mas os diapositivos não devem ser empregados para reproduzir o que você diz e nunca devem ser lidos do écran.

Os diapositivos devem ser legíveis e inteligíveis. Um diapositivo que não possa ser lido por qualquer um na

audiência, incluindo as pessoas da última fila, não deve ser projectado.

A primeira condição para que um diapositivo seja legível é que ele apareça integralmente no écran. Isto parece trivial, mas é vulgar ver apresentadores que inserem diapositivos "verticais" no meio de diapositivos orientados horizontalmente e assim aqueles são projectados no tecto. Isto pode ser evitado, preparando todos os diapositivos para serem projectados horizontalmente. Outra condição é as letras serem grandes e as linhas mais grossas do que para uma figura impressa. Qualquer diapositivo que não possa ser lido o olho nu na sua mão, provavelmente não será legível quando for projectado num écran. Este é um teste rigoroso para a legibilidade; é simples e funciona.

Este diapositivo visto a uma distância de 25 cm dá uma indicação de como ele irá aparecer no écran de projecção, visto dos últimos lugares de uma sala de conferências.

- Prepare diapositivos simples
- Use o espaço com eficiência
- Realce a sua mensagem
- Poucas palavras, letras grandes
- Limite o n.º de diapositivos

⑤

Em "Preparation of Slides; a Guide for Authors" da **International Federation of Automatic Control** são dadas indicações para a preparação de bons diapositivos. De entre as suas recomendações tem-se:

- (1) Um bom diapositivo deve comunicar uma mensagem única e significativa em apoio da apresentação oral.
- (2) Normalmente é vantajoso simplificar tabelas, gráficos, diagramas e desenhos.
- (3) Só são recomendadas tabelas se o seu conteúdo não puder ser traduzido graficamente.
- (4) Não reproduza material de publicações impressas, excepto quando for material apropriado. Na maior parte dos casos, as ilustrações impressas apresentam demasiados pormenores.
- (5) Use um escantilhão (normógrafo) para as letras do texto. Deixe espaço adicional entre as palavras e linhas.

Outra sugestão útil é a de colocar uma etiqueta (auto-adesiva) com um número no canto inferior esquerdo do diapositivo (na posição em que o diapositivo é visto). Isto simplifica a ordenação dos diapositivos e assegura que sejam projectados de forma correcta. Quando o diapositivo for colocado correctamente no projector, a etiqueta numerada ficará coberta pelo polegar direito do operador.

Para todo o trabalho de arte-final, use, numa página padrão A4, 180 × 240 mm, nunca um formato maior. Numa página deste tamanho, pode escrever as fórmulas com dimensões adequadas, empregando escantilhões comerciais (feitos, por exemplo, pela Verlag Chemie, Merck, Darmstadt, Molin, etc.).

Limite a quantidade de informação de cada diapositivo. Procure pôr um "bit" de informação por diapositivo e não hesite em desmembrar um conjunto de dados em dois diapositivos. Para evitar a acumulação de informação em cada diapositivo não exceda 20-25 palavras por diapositivo.

Não inclua informações sobre as quais não vai tecer comentários — nomenclatura, pontos de fusão e referências bibliográficas. Pense duas vezes antes de mostrar um espectro de r.m.n. ou um cromatograma (é mesmo uma novidade?). Tire ds seus diapositivos todo o ruído desnecessário, isto é, informação sem propósito aparente. Nunca mostre tabelas numéricas (embora o possa fazer sem problemas, se a tabela for suficientemente simples e dentro do limite de 20-25 palavras/diapositivo).

Diapositivos legíveis não implicam um trabalho de profissional; letras decalcáveis (tais como Letraset, Decadry, etc.) permitem que os químicos façam desenhos e legendas com um toque profissional. Letras e esquemas feitos à mão podem também ser eficazes e elaborados com mais facilidade mas deve ter uma escrita legível e alguma queda para o desenho. Experimente uma vez e faça-os avaliar por amigos antes de os expor à audiência.

Os diapositivos são especialmente valiosos se vai preferir uma palestra numa língua que não domina totalmente. Eu poucas palavras, pode resumir o problema, os métodos, os resultados e as conclusões. Erros gramaticais podem ser eliminados previamente pela avaliação e correcção dos diapositivos.

Cada tipo de diapositivo apresenta vantagens e desvantagens. Por exemplo diapositivos com figuras em preto sobre fundo branco mostram mais poeira do que diapositivos de branco em preto, mas são mais fáceis de ler. A maior limitação na qualidade de qualquer sistema de diapositivos é a experiência, o equipamento e o cuidado do fotógrafo. Consulte-o; ele sabe que tipo de material é melhor reproduzido e mais legível. Também pode ler artigos que dão orientação sobre isto (o folheto "Slides with a purpose" pode ser obtido gratuitamente no Dep. 55Z, Kodak Inc., Rochester N. Y. 14650 USA).

O mesmo diapositivo pode ser necessário duas ou mais vezes durante a conferência. Providencie duas ou mais cópias em vez de esperar que o encarregado da projecção encontre, às escuras, o "diapositivo n.º 15".

Identifique a orientação dos seus diapositivos por meio de uma etiqueta ou marca na armação, facilmente identificável e bem visível no escuro. Isto é absolutamente necessário se só se dispõe de um projector e pode ser valioso se se usar um projector automático.

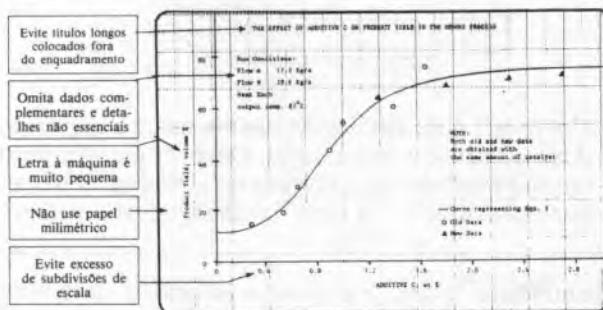
Bem antes da sua apresentação, entre em contacto com as pessoas encarregadas da sala de conferências. Apresente-se ao encarregado da projecção; muito do seu sucesso dependerá dele. Pergunte como é que ele prefere que lhe peça o diapositivo seguinte e veja se há suportes disponíveis. Coloque os diapositivos no suporte, verifique a sua orientação e decida se é preferível o escurecimento total ou parcial da sala. Verifique a qualidade e o tamanho das imagens na tela. Se os diapositivos se mostrarem inaceitáveis para as condições disponíveis, a sua conferência ainda poderá ser salva por um rectro-projector ou pelo giz no quadro.

É espantoso como mesmo alguns oradores com experiência ficam aparentemente indiferentes ao deixarem um encarregado de projecção cansado arruinar a apresentação, ao mostrar diapositivos mal focados, por or-

dem errada e após pedidos repetidos do diapositivo seguinte. Ainda pior são o tempo e a atenção perdidos pela audiência enquanto se experimentam as sete orientações erradas possíveis para um diapositivo, antes de encontrar, por acaso, a posição correcta. Geralmente, estes problemas evitam-se, se houver uma conversa prévia com o encarregado da projecção.

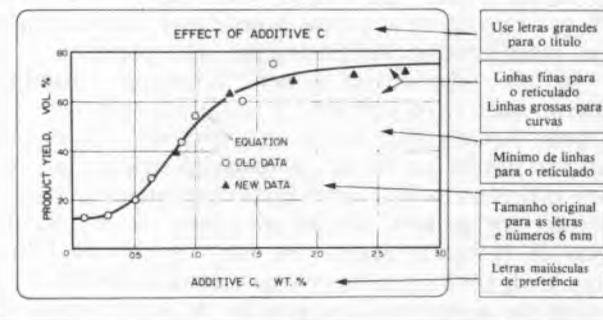
A ocasião que poderá dar mais problemas durante um simpósio é a Conferência de Abertura. É nesta altura que os organizadores se podem aperceber que o écran é pequeno, que não há giz de cores nem lâmpada sobresalente para o projector, de que a iluminação não se pode escurecer parcialmente ou que o microfone não funciona. Não desespere. Se for o conferencista da abertura não precisará de conselhos. Sem dúvida a sua habilidade a sobreviver a tais problemas foi um dos factores que contribuiu para o alto conceito que lhe dispensa a comunidade química e para o convite que lhe foi feito para apresentar a conferência da abertura.

Exemplo de uma ilustração de má qualidade para ser projectada:



Os dois diapositivos apresentam o mesmo material, mas o inferior foi re-desenhado para maior simplicidade e clareza. Os pormenores explicativos e dados acessórios foram omitidos, podem ser apresentados oralmente se necessário ou se forem pedidos (adaptado de "Preparation of Slides; a Guide for Authors").

Exemplo de uma ilustração de boa qualidade para ser projectada:



III. APRESENTAÇÃO DE CARTAZES ("POSTERS")

As sessões de cartazes têm ganho larga aceitação para a comunicação de informação e motivação para a discussão em congressos, fornecendo uma alternativa viável às comunicações orais de curta duração — uma

Painel n.º 123

Sumário:

TECIDOS CLORADOS COMO MATÉRIA-PRIMA PARA PESTICIDAS
C. LEITE QUEIMADO (DEP. QUÍMICA, UNIV. DE FUGACIDADE, FUGACIDADE, ELLOBOVIA)

INTRODUÇÃO
Os tecidos clorados têm

.....

.....

.....

.....

RESULTADOS
Verificámos que

.....

.....

.....

.....

Tecido + Cl₂
Tecido — Cl + Cl'

.....

.....

Não, porque

.....

.....

CONCLUSÕES

.....

.....

.....

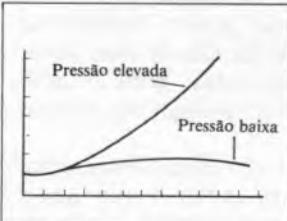
.....

.....



Variação com a pressão

XXX	XXX	XX	XXX
XXX	XXX	XX	XXX
XXX	XXX	XX	XXX
XXX	XXX	XX	XXX
XXX	XXX	XX	XXX
XXX	XXX	XX	XXX



Um painel deve apresentar sucintamente a importância do projecto, as informações básicas essenciais e os resultados e conclusões dos autores. Deve ser auto-explicativo, embora os autores devam estar preparados para apresentar dados adicionais e discutir os métodos. O painel deve ser disposto de um modo claro, com letras grandes para fácil visualização. A uma distância de três metros, o painel deve apresentar-se como este.

oportunidade maior à discussão informal, permitindo que os autores experimentem métodos originais de apresentação. Os autores podem apresentar amostras de substâncias-chave, dados, trabalhos publicados, fotografias das suas aparelhagens, de trabalhos de campo ou deles próprios. É importante reconhecer que as sessões de painéis *não são* relegadas para comunicar investigações de segundo plano, mas permitem que interesses de investigação comuns sejam discutidos individualmente ou em pequenos grupos.

A maioria dos quadros, desenhos e ilustrações utilizados em painéis podem ser bastante semelhantes àqueles que seriam usados para fazer diapositivos embora sejam geralmente menos bem acabados e feitos com linhas mais grossas. As ilustrações não precisam — e, na verdade, não devem — ser “artísticas”. Produza material ilustrativo simples. O simples emprego de cores pode proporcionar realce com eficiência. Os diagramas não devem ser feitos em material rígido, pois isto pode dificultar a sua montagem nos quadros para a exibição dos painéis. Talvez seja bom ter à mão um bloco de rascunho e uma ou duas canetas de feltro. O que pode ser incluído numa apresentação de painéis fica limitado apenas pela imaginação do autor (dentro do limite de espaço disponível). Muitos autores começam por elaborar uma etiqueta contendo o título, o nome dos autores e o número atribuído ao painel, de modo que este seja facilmente identificável (a etiqueta pode também ser fornecida pelos organizadores da conferência). Pode incluir também o horário em que os autores estarão disponíveis para discutir os painéis. Normalmente afixa-se uma cópia do resumo. A etiqueta e as ilustrações são montadas numa placa de madeira, geralmente com pu-

nais. Se precisar de fita-cola, talvez seja necessário levá-la consigo. É aconselhável ter disponível todas as figuras, tabelas e equações pertinentes, mesmo que não planeie afixá-las. Os painéis devem ser preparados pelos autores antecipadamente e devem ser montados e removidos no horário afixado previamente pelos organizadores da conferência. A maioria das conferências tem “assistentes para as sessões de painéis” prontos a responder a dúvidas e a ajudar sempre que surgem problemas técnicos.

Os painéis devem ser geralmente preparados de modo a que sejam compreendidos mesmo na ausência dos autores e sem um estudo do resumo. As secções podem ser subdivididas em SUMÁRIO (ou resumo), INTRODUÇÃO, RESULTADOS e DISCUSSÃO. O SUMÁRIO deve indicar os resultados e as conclusões pertinentes. A INTRODUÇÃO deve dar as informações básicas e indicar o propósito do estudo em relação a trabalhos anteriores no mesmo campo. A secção de RESULTADOS pode ser dividida em subtítulos, cada um indicando um resultado importante. Geralmente, inclui-se o *menor* número de resultados, apenas os suficientes para justificar as conclusões. Um painel sobrecarregado de resultados raramente atrai a atenção. De facto, não se é obrigado a preencher todo o espaço disponível com as informações! Finalmente, a secção de DISCUSSÃO deve conter a interpretação dos resultados e apresentar o seu significado, mesmo que seja especulativa — resumindo as conclusões de uma forma fácil de relembrar.

É importante planejar cuidadosamente a utilização óptima do espaço do painel. Pode ser útil subdividir em secções de tamanho padronizado (por exemplo, 9 secções de

O coeficiente de correlação

Quanto mais próximo de 1 melhor?

Raquel M.C. Gonçalves^a
Ana M.N. Simões^a

1. Introdução

A simples pressão de uma tecla numa não menos simples calculadora de bolso é, hoje em dia, o quanto basta para obter o valor do coeficiente de correlação, medida do ajuste de uma determinada função aos resultados experimentais.

Ao acréscimo de frequência na determinação do coeficiente de correlação, contudo, tem vindo a corresponder um decréscimo na execução de gráficos, na sua maioria manuais e enfadonhos, o que, aliado à interpretação incorrecta do valor daquela grandeza — QUANTO MAIS PRÓXIMO DE 1 MELHOR — pode conduzir a conclusões erróneas relativamente à qualidade do ajuste.

A Química, como muitas outras ciências, já não dispensa o uso de análise estatística, e o cálculo do coeficiente de correlação é de utilidade inegável. Com este trabalho pretendemos contribuir para a sua adequada utilização.

Ilustra-se o exposto com alguns exemplos.

2. Definição

Sejam $(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in}, y_i)$ N observações que se relacionaram estatisticamente por uma função analítica linear nos coeficientes a_0 e a_j :

$$y = a_0 + \sum_{j=1}^n a_j x_j \quad (1)$$

utilizando o método dos mínimos quadrados.

O coeficiente de correlação entre y e x_j , r_{jy} , é definido por:

$$r_{jy} = \frac{s_{jy}^2}{s_j s_y} \quad (2)$$

s_j e s_y representam os desvios padrão estimados da amostra para x_j e y , respectivamente, e s_{jy}^2 a covariância estimada da amostra entre as variáveis citadas, isto é,

$$s_j = \left\{ \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_{ij} - \bar{x}_j)^2 \right\}^{1/2} \quad (3)$$

$$s_y = \left\{ \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \right\}^{1/2} \quad (4)$$

$$s_{jy}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N ((x_{ij} - \bar{x}_j)(y_i - \bar{y})) \quad (5)$$

\bar{x}_j e \bar{y} são os valores médios:

$$\bar{x}_j = \frac{\sum_{i=1}^N (x_{ij})}{N} \quad \text{e} \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i)}{N}$$

No caso particular de uma recta, $n=1$ na equação (1), a equação (2) toma a seguinte forma:

$$r = r_{xy} = \frac{N \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{[N \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2]^{1/2} [N \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2]^{1/2}} \quad (6)$$

onde todos os somatórios se referem à variação do índice i de 1 até N . É esta, pois, a expressão que permite obter o vulgarizado coeficiente de correlação de uma recta, r .

O coeficiente de correlação, contudo, pode também ser definido entre quaisquer duas variáveis "independentes", x_j e x_k , por uma expressão idêntica à equação (2):

$$r_{jk} = \frac{s_{jkk}^2}{s_j s_k} \quad (7)$$

em que s_j e s_k são obtidos por expressões do tipo da equação (3) e s_{jkk}^2 da equação (5) onde o factor $(y_i - \bar{y})$ deve ser substituído por $(x_{ik} - \bar{x}_k)$.

Quer (2), quer (7), permite medir a correlação entre duas variáveis.

Por esse motivo, r , assim obtido, designa-se por *coeficiente de correlação simples*.

Este conceito, porém, pode ser extrapolado de modo a incluir correlações múltiplas entre grupos de variáveis tomadas simultaneamente. Tendo por base a equação (1), o *coeficiente de correlação múltipla*, R , é dado por:

$$R = \left\{ \sum_{j=1}^n (a_j s_{jy}^2 / s_y^2) \right\}^{1/2} = \left\{ \sum_{j=1}^n (a_j s_j r_{jy} / s_y) \right\}^{1/2} \quad (8)$$

Enquanto que o coeficiente de correlação simples entre x_j e y é útil para testar se a variável j deve ou não ser incluída na função de ajuste, o coeficiente de correlação múltipla indica sobre a adequação da função como um todo.

3. Significado

O coeficiente de correlação não é uma grandeza desligada da análise de regressão e do método dos mínimos

^a CECUL — Instituto Bento da Rocha Cabral, 14, 1200 Lisboa.

quadrados. Quer isto dizer que o tratamento estatístico das observações só deve ser efectuado após verificação do cumprimento dum certo número de condições. Transcrevem-se em seguida, de uma forma resumida, as hipóteses subjacentes ao método dos mínimos quadrados:

- 1 — A equação imposta deve ser uma função “correcta”; deve conter todas as variáveis com interesse.
- 2 — $\Delta y_i = y_i - y_{calc}$ são aditivos; a função de distribuição de y_{calc} tem a mesma forma da distribuição de Δy_i .
- 3 — As variáveis independentes não têm erro; toda a incerteza está concentrada em y_i .
- 4 — Δy_i são independentes entre si.
- 5 — Δy_i tem uma distribuição gaussiana; o critério de estimativa dos coeficientes a_0 e a_j é o dos mínimos quadrados.
- 6 — Δy_i tem distribuição em torno de zero; não há desvios sistemáticos.
- 7 — O desvio padrão dos valores experimentais é, frequentemente considerado constante.

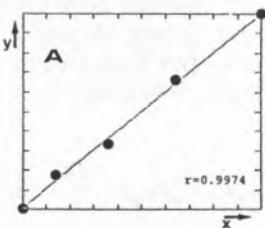
Uma fonte de erro possível na interpretação do coeficiente de correlação pode, pois, provir do não cumprimento de algumas destas hipóteses.

Outra fonte de erro possível advém da apresentação de valores do coeficiente de correlação sem o indicativo, indispensável, do número de graus de liberdade. De facto, valores daquela grandeza, só por si, não podem ser usados para indicar o grau de correlação entre variáveis. Um teste comum consiste em comparar os valores do coeficiente de correlação com a probabilidade de distribuição de uma população semelhante não correlacionada, P. Constroem-se, assim, tabelas de que é exemplo a Tabela 1 para o caso de uma relação linear. A variação do valor do coeficiente de correlação com o número de observações, para igual probabilidade de não correlação, é notável. Por exemplo, $r=0.991$ para uma amostra de 5 pares de pontos tem o mesmo significado estatístico que $r=0.324$ para 100 pares de pontos ($P=0.001$).

4. Exercícios

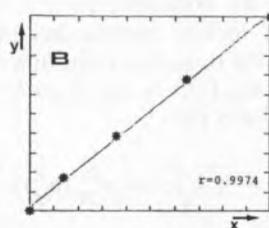
Problema 1

x	1	3	6	10	15
y	0.8	2.5	4.0	7.0	10.2



$y = 0.2444 + 0.6651 x$

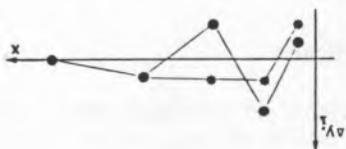
x	1	3	6	10	15
y	0.8	2.4	4.4	7.0	10.0



$y = 0.3533 + 0.6524 x$

Qual a função de melhor ajuste?

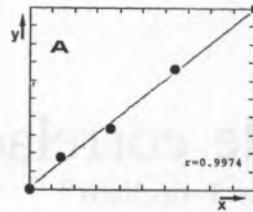
Resposta:



Um teste 6. A função A tem melhor ajuste. A função B não cumpre a hipó-

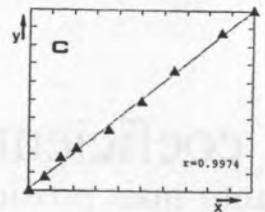
Problema 2

x	1	3	6	10	15
y	0.8	2.5	4.0	7.0	10.2



$y = 0.2444 + 0.6651 x$

x	1	2	3	4	6	8	10	13	15
y	0.8	1.5	2.5	3.0	4.0	5.4	7.0	9.0	10.2



$y = 0.2204 + 0.6680 x$

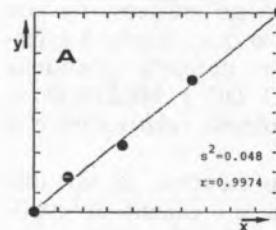
Qual a função de melhor ajuste?

Resposta:

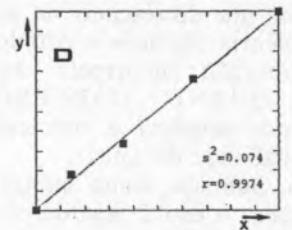
A função C tem melhor ajuste. Igual valor de r, para maior número de pontos, significa maior probabilidade de correlação entre as variáveis.

Problema 3

x	1	3	6	10	15
y	0.8	2.5	4.0	7.0	10.2



$y = 0.2444 + 0.6651 x$



$y = 0.2371 + 0.6682x - 0.0002x^2$

Qual a função de melhor ajuste?

Resposta:

A função A tem melhor ajuste. A equação que melhor se adapta aos valores experimentais é a que corresponde ao menor valor da variância estimada do ajuste $s^2 = \Sigma(\Delta y_i)^2 / (N-n-1)$.

Tabela 1
r em função de N e P

N \ P	0.50	0.20	0.10	0.050	0.020	0.010	0.005	0.002	0.001
3	0.707	0.511	0.368	0.297	0.200	0.100	0.000	0.000	0.000
4	0.500	0.300	0.200	0.100	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5	0.404	0.200	0.100	0.050	0.020	0.010	0.005	0.002	0.001
6	0.347	0.160	0.080	0.040	0.020	0.010	0.005	0.002	0.001
7	0.309	0.130	0.060	0.030	0.015	0.008	0.004	0.002	0.001
8	0.281	0.110	0.050	0.025	0.012	0.006	0.003	0.001	0.000
9	0.260	0.100	0.040	0.020	0.010	0.005	0.002	0.001	0.000
10	0.242	0.090	0.030	0.015	0.008	0.004	0.002	0.001	0.000
11	0.228	0.080	0.025	0.012	0.006	0.003	0.001	0.000	0.000
12	0.216	0.070	0.020	0.010	0.005	0.002	0.001	0.000	0.000
13	0.206	0.060	0.015	0.008	0.004	0.002	0.001	0.000	0.000
14	0.197	0.050	0.010	0.006	0.003	0.001	0.000	0.000	0.000
15	0.189	0.040	0.008	0.005	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000
16	0.182	0.030	0.006	0.004	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000
17	0.176	0.025	0.005	0.003	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.170	0.020	0.004	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.165	0.018	0.003	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
20	0.160	0.016	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.152	0.012	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
24	0.145	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
26	0.138	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.132	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
30	0.128	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
32	0.124	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34	0.120	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
36	0.116	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
38	0.113	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
40	0.110	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
42	0.107	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
44	0.104	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.102	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
48	0.100	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
50	0.098	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
60	0.089	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
70	0.082	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
80	0.077	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
90	0.072	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
100	0.068	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Bibliografia

- P.R. Bevington, “Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences”, McGraw-Hill, New York, 1969.
- D.G. Watts, “Kinetic Data Analysis”, Plenum Press, New York, 1981.
- R.J. Cvetanovic, D.L. Singleton e G. Paraskeopoulos, J. Phys. Chem., 1979, 83, 50.
- M.D. Pattengill e D.E. Sands, J. Chem. Educ., 1979, 56, 244.
- R.B. Huff e K.N. Carter, J. Chem. Educ., 1981, 58, 49.
- P.F. Tiley, Chem. in Britain, 1985, 162.

Os livros

Guia dos compostos orgânicos e bioquímicos, *Estruturas e nomenclatura*, Luís S. Campos, Europress (1987).

(edição cartonada: 3750\$00; edição corrente: 2925\$00)

Pouquíssimo tem sido feito, em Portugal, pela normalização da nomenclatura da Química Orgânica, e menos ainda pela dos compostos bioquímicos. E, no entanto, quanto à Química Orgânica, já há quase um século se acordou, em Genebra, na necessidade premente do estabelecimento de regras internacionais, as quais, no respeitante a hidrocarbonetos e sistemas heterocíclicos, começaram então (em 1892) a ser preparadas, vindo a ser revistas e completadas em Liège (1930) para, após outras revisões e aditamentos, serem finalmente publicadas pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC).

É certo que o trabalho da própria IUPAC tem sido moroso e não se acha sequer completado; é certo, também, que, no que respeita à Bioquímica, o esforço da IUPAC, primeiro, das comissões conjuntas IUPAC-IUB, mais tarde, e da própria IUB através da sua comissão de nomenclatura — CBN, se tem traduzido mais em “recomendações” do que propriamente em “regras”.

Porém, o que ficou estabelecido desde Genebra (1957) e, depois, em 1969 [Secção C — Grupos característicos que contêm os elementos C, H, O, N, Halogénios, S, Se (Te)], viria a constituir só por si as bases sólidas para a nomenclatura de centenas de milhar de outras estruturas, já que a nomenclatura dos hidrocarbonetos e dos sistemas heterocíclicos fundamentais tem aplicação em praticamente todos os grupos de compostos — como o comprovam os resultados a que, embora vagarosamente, vêm chegando as comissões de nomencla-

tura especializadas, as quais têm esbarrado sobretudo naqueles tipos de estrutura tão diversificados como os lípidos (hidrocarbonetos excluídos), os esteróides e as enzimas. Mas, mesmo aí, existem, quando não “regras”, recomendações quanto ao uso de nomes sistemáticos, semi-sistemáticos ou vulgares, Que, por terem saído donde saíram, devem ser cumpridas — seja no Reino Unido como em França ou Portugal — e não ignoradas ou deturpadas, quanto mais não seja porque as recomendações das Comissões de Nomenclatura, tanto da IUPAC como da IUB, ou das comissões conjuntas, vão sempre e insistentemente no sentido de que, em cada país, a nomenclatura seguida o seja em conformidade com a aprovada oficialmente, mesmo quando esta não pareça a mais adequada (sob o ponto de vista linguístico, entenda-se) aos químicos desse país; e de que, em cada país, nas adaptações que sejam indispensáveis, se tente reduzir ao mínimo as alterações que respeitam à construção de nomes, posição de algarismos, abreviaturas, uso de itálico, etc.

O facto é que, entre nós, as próprias regras-base de 1957 são constantemente contrariadas ou confundidas no que se refere a aspectos fundamentais, como sejam a colocação dos algarismos de posição e a ordem dos prefixos respeitantes a substituintes — neste último caso, por geralmente se desconhecer que as próprias regras IUPAC admitem dois critérios.

Acresce, por outro lado, que algumas recomendações das comissões internacionais se confrontam, por vezes, com normas estabelecidas (p. ex., na nomenclatura dos esteróides). Que fazer, nesses casos?

Com a obra que se apresenta pretende-se esclarecer a linguagem da Química Orgânica e da Bioquímica, sem o conhecimento da qual continuará a agravar-se a confusão que afecta e aflige professores, técnicos, investigadores e estudantes.

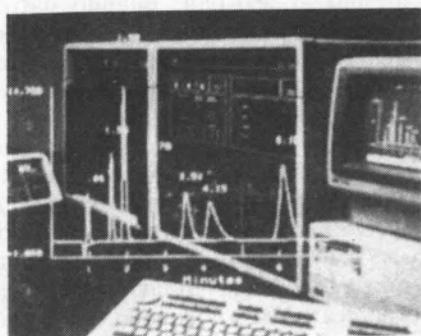
(do “Prefácio”)



DIAS DE SOUSA LDA

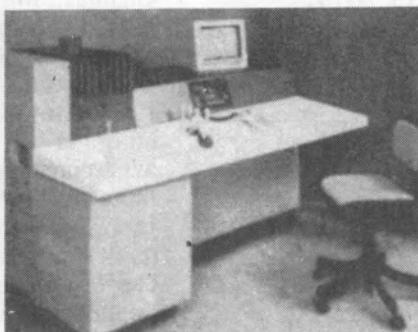
INSTRUMENTAÇÃO ANALÍTICA

Distribuidores exclusivos em Portugal de:



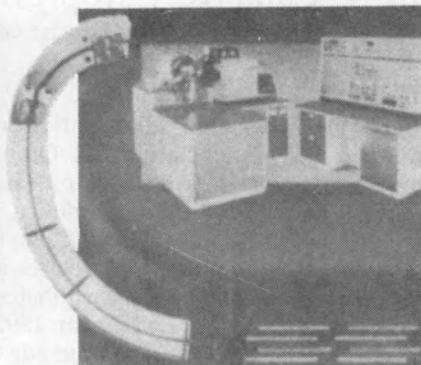
Cromatografia Iónica

DIONEX



Espectrometria de Emissão

**JOBIN
YVON**



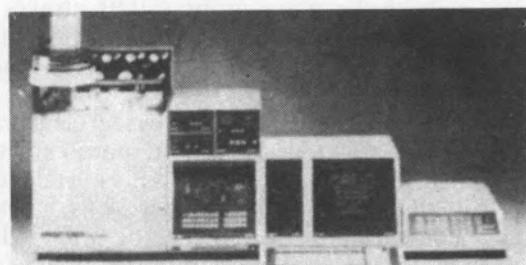
Espectrometria de Massa

**KRATOS
ANALYTICAL**



Cromatografia HPLC
Integradores-Registadores computadorizados

Spectra-Physics



Instrumentação Científica

**CARLO ERBA
STRUMENTAZIONE**

Ao vosso serviço com Seriedade, Apoio Técnico e Analítico especializado, Enquadramento laboratorial.

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 12 - 1.º D.
2625 PÓVOA DE STA. IRIA
TEL. (01) 259 23 16 - 259 24 09
TLX. 43926 DISO P

PRAÇA PEDRO NUNES, 94
4000 PORTO
TEL. (02) 93 14 99 - 93 38 09
TLX. 26250 NSC P

Congressos e Conferências

1987			13-16			Umea (Suécia)	11th European Conference on Thermophysical Properties
Outubro			19-24			Washington (USA)	12e Symposium International de Chromatographie en Phase Liquide sur Colonnes
1-2	Lille (França)	Journées Franco-Belges de Pharmacochimie	26-1/7			Calgary (Canadá)	9th Congress on Catalysis
7-9	Frankfurt-Hoechst (RFA)	Organische Elektrochemie	Julho				
19-23	Stuttgart (RFA)	Ecasia 87 European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis	4-7			Nancy (França)	7th IUPAC Conference on Organic Synthesis
19-23	Schloss Elmau (RFA)	Euchem Conference Biotechnology in Chemistry — Biocatalysis and Bioprocess Engineering	11-14			Praga (Checoslováquia)	11th Discussion Conference on Macromolecules: Chemical and Physical Phenomena in the Ageing of Polymers
Novembro			11-15			Brighton (RU)	International Conference on Nuclear and Radiochemistry
8-13	Barcelona (Espanha)	Expoquímica 87 — Equiplast 87 — Euro/Surfas 87	17-22			Paris (França)	8th International Biotechnology Symposium
19-21	Plovdiv (Bulgária)	Chemical Products for the Electronics	18-21			Praga (Checoslováquia)	31st Microsymposium on Macromolecules: Poly (Vinyl Chloride)
Dezembro			Agosto				
7-11	Lisboa (Portugal)	4th International Symposium on the Natural Radiation Environment	1-6			Quioto (Japão)	32nd International Symposium on Macromolecules
15-16	Reading (RU)	Faraday Symposium on Molecular Vibrations	15-19			Freiburg (RFA)	12th International Liquid Crystal Conference 1988
1988			15-19			Budapest (Hungria)	10th International Symposium on Medicinal Chemistry
Janeiro			16-19			Tóquio (Japão)	7th International Symposium on Mycotoxins and Phycotoxins
7-30	Cádiz (Espanha)	IV Seminário de Química Marina — Cádiz	21-27			Regensburg (RFA)	9th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry
4-8	Bangueroque (Tailândia)	1st Eurasia Conference on Chemistry of Solution	23-26			Guildford (RU)	3rd International Symposium on Solubility Phenomena
Fevereiro			29-2/10			Porto (Portugal)	26th International Conference on Coordination Chemistry
1-3	Baden-Baden (RFA)	International Symposium on Preparative and Up Scale Liquid Chromatography	Setembro				
Mai			4-9			Turim (Itália)	13th International Conference on Organometallic Chemistry
24-27	Paris (França)	2nd World Surfactants Congress	5-9			Hamburgo (RFA)	13th International Symposium on Macrocyclic Chemistry
29-3/6	Quioto (Japão)	IUPAC 88 Kioto 16th International Symposium on the Chemistry of Natural Products	12-15			Freiburg (RFA)	4th European Symposium on Inorganic Chemistry
Junho			18-23			Viena (Áustria)	17th International Symposium on Chromatography
5-11	Frankfurt (RFA)	International Meeting of Chemical Engineering and Achema — Chemical Engineering Exhibition Congress	30-30			Itália	Surface properties of Non Metallic Solids
5-11	Toronto (Canadá)	195th ACS National Meeting and 3rd Chemical Congress of North America					

Outubro			20-25	Tonaka (Japão)	6th International Symposium on Novel Aromatic Compounds
1-1	?	International Symposium Computational Methods in Chemical Design: Molecular Modelling and Computer Graphics	28-1/9	Wiesbaden (RFA)	11th International Symposium on Microchemical
10-12	Cannes (França)	International Scientific Meeting on Supercritical Fluids	Outubro		
Dezembro			9-14	Dusseldorf (RFA)	Interkama 89: 11th International Congress with Exhibition for Instrumentation and Automation
3-9	Pequim (China)	Chemtech China 88	1990		
	?	Euchem Conference Gas Phase Reactions	Julho		
1989			1-1	Tuebingen (RFA)	International Conference on Synthetic Metals 90
Junho			23-27	Helsinquia (Finlândia)	8th International Conference on Organic Synthesis
5-9	Karlsruhe (RFA)	2nd International Conference on Analytical Chemistry in Nuclear Technology	Agosto		
Agosto			?	Viena (Áustria)	Euroanalysis VII 7th European Conference on Analytical Chemistry
2-7	Estocolmo (Suécia)	32nd International Congress of Pure and Applied Chemistry	5-10	Hamburgo (RFA)	7th IUPAC Congress on Pesticide Chemistry

Apresentação de resultados (Continuado da pág. 26)

40 × 60 cm). Os painéis devem ser legíveis de uma distância de 2 a 3 metros. Gráficos e tabelas devem ter uma altura mínima de 20 cm.

Um tamanho recomendável para a legenda das figuras e tabelas e para as palavras-chave do texto é a de 1 a 1,5 cm de altura. Letras de tamanho menor e linhas mais finas que 2 mm não são facilmente visíveis à distância. Material escrito à máquina nunca deve ser empregue se não for ampliado.

As tabelas e figuras devem ter um título curto. Numa tabela é melhor restringir-se a quatro colunas, com não mais de quatro linhas por coluna. Os gráficos devem conter um máximo de três curvas. A representação de curvas com cores diferentes distingue-as com facilidade e é muito útil quando as curvas se cruzam ou estão muito próximas. Os eixos dos gráficos devem ter o significado claramente expresso e não conter informação excessiva; assim, se um eixo apresenta uma variação de 0 a 10 unidades, é suficiente caracterizar 0,5 e 10. É aconselhável evitar muitos dígitos, sendo preferível escolher 0,5 e 1,0 unidades em vez de 500 e 1000 milunidades.

O espaço por baixo de uma tabela ou figura pode conter um texto *sucinto* que descreva as conclusões pertinentes. Esta legenda pode também orientar o leitor para a experiência seguinte. Os autores devem estar preparados para discutir pormenores experimentais, quando solicitados por qualquer pessoa interessada, mas estas informações não devem ser incluídas na legenda do painel, como é usual em trabalhos publicados.

Um procedimento mais útil é montar o painel antes de ir para a conferência e expô-lo no seu laboratório onde possa ser visto e discutido pelos seus colegas e ser possivelmente melhorado. Embora as sessões de painéis ofereçam um ambiente informal para a discussão de projectos de investigação, a maioria dos participantes não sente, realmente, a sensação de espontaneidade que emana de um autor que vê o seu painel pela primeira vez.

Uma lista de testes para autores de painéis:

RESUMO

É suficientemente conciso para chamar a atenção?

INTRODUÇÃO

Fornece as informações básicas para que se compreenda o propósito do estudo apresentado?

RESULTADOS

Tem tantos resultados que vão obscurecer a contribuição principal?

O texto-chave entre as tabelas e figuras é um bom elo de ligação entre as mesmas?

DISCUSSÃO

O formato é suficientemente atractivo para estimular a discussão?

TECNOLOGIA

Letras: O tamanho escolhido para os títulos, tabelas, figuras e texto-chave é suficientemente grande?

Tabelas: Têm todas um título sucinto? Não contêm mais do que 16 itens?

Figuras: Têm todas um título sucinto? Não há mais que três curvas em cada gráfico?

As linhas dos gráficos são facilmente distinguíveis? Cada linha dos gráficos possui uma legenda que a descreve? Os eixos não estão sobrecarregados de informação?

boletim

SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE
QUIMICA



O Boletim da Sociedade Portuguesa de Química é o melhor suporte para tomar contacto com os químicos e engenheiros químicos portugueses e com as instituições e firmas que os empregam

Para as suas inserções publicitárias escreva para a Sociedade Portuguesa de Química, Av. da República, 37, 4.º 1000 LISBOA, ou telefone para 57 26 16 ext 266 (Eng.ª Matilde Marques)

NORMAS PARA A PUBLICAÇÃO DE ORIGINAIS NO BOLETIM

1. Os originais devem ser enviados em 3 exemplares (dactilografados) em envelope dirigido ao director do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, Av. da República, 37, 4.º, 1000 LISBOA.
2. Os originais não devem exceder, na generalidade, 15 páginas dactilografadas a 2 espaços.
3. As gravuras, desenhos, esquemas e outras figuras que acompanhem os originais devem estar numeradas e acompanhadas das legendas correspondentes. A qualidade das ilustrações deve permitir uma boa reprodução. As fórmulas complexas devem ser preparadas como ilustrações.
4. Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores.
5. As regras de nomenclatura a utilizar devem ser exclusivamente as regras recomendadas pela IUPAC.
6. Compete à Direcção do Boletim a aceitação da publicação de qualquer original que lhe seja submetido. Em caso de dúvida sobre o interesse desta, o original será submetido a apreciação por, pelo menos, dois especialistas sócios da SPQ designados pela Direcção do Boletim.

PREÇO DA PUBLICIDADE POR NÚMERO DO «BOLETIM»

Página interior (só preto)

1/8 de página.....	5 000\$00
1/4 de página.....	7 000\$00
1/2 página.....	10 000\$00
1 página.....	15 000\$00

Capa 3 (a duas cores)

1/8 de página.....	7 000\$00
1/4 de página.....	10 000\$00
1/2 página.....	15 000\$00
1 página.....	25 000\$00

Capa 4 (a duas cores)..... 35 000\$00

