

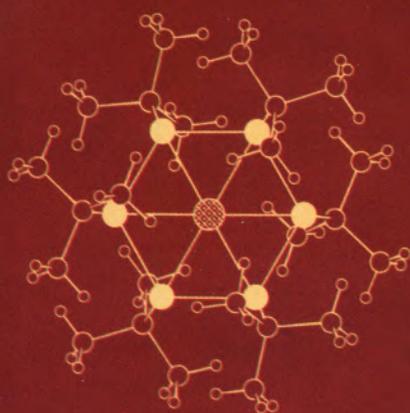
QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

SPQ
Nova imagem



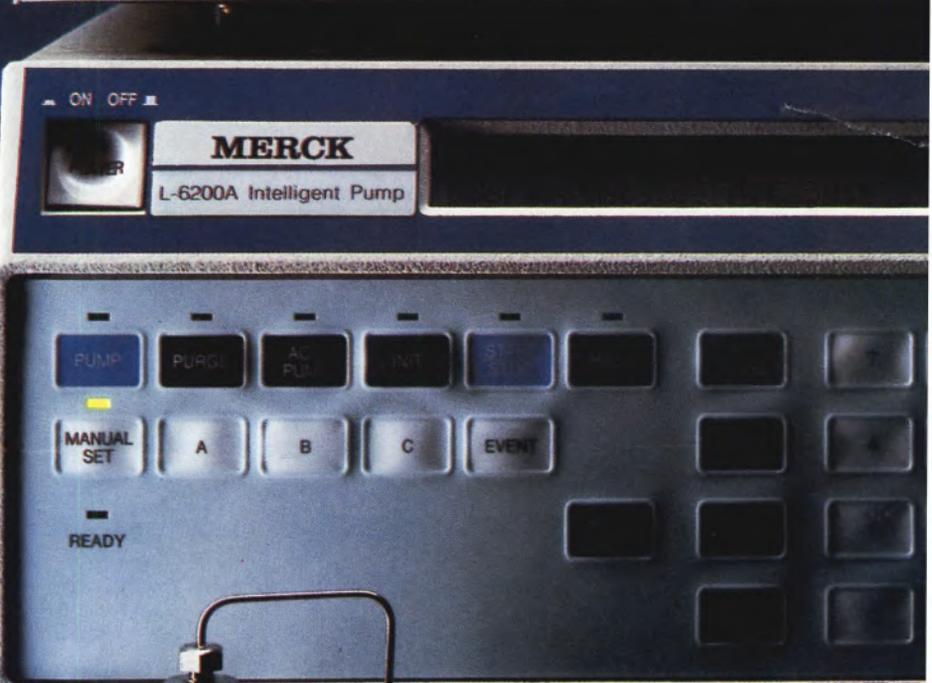
SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA



$[Ni(P-t-Bu)_6]$
Uma curiosa molécula

O Sistema de HPLC da Merck: Flexível, Compatível, Modular.

O HPLC à medida das suas necessidades



Merck Portuguesa, Lda.
Rua Alfredo da Silva, 3C
1300 LISBOA
Telef. 362 14 34
Fax 362 14 45

MERCK



QUÍMICA

Boletim da Sociedade Portuguesa de Química

Propriedade da:
Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870-1180
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 50 - Julho-Setembro 1993

Redacção e Administração
Avenida da República, 37 - 4.º 1000 LISBOA
Telefone: (01) 793 46 37
Telefax: (01) 795 23 49

Director
Mário Nuno M.S. Berberan e Santos

Editor
Carlos Pessoa

Direcção Gráfica
Luís Moreira

Secretária de Redacção
Cristina Campos

Comissão Editorial
Jorge Calado (IST)
Alberto Romão Dias (IST)
Maria José Calhorda (IST)
Paulo Agostinho (ES de Porto Salvo)
Maria Gabriela Cepeda Ribeiro (UM)

Colaboradores
José A. Martinho Simões (FCL)
Joaquim Moura Ramos (IST)
Fernando Fernandes (FCL)
António Amorim da Costa (UC)
Manuel E. Minas da Piedade (IST)
João Paulo Leal (INETI)

Publicidade
Hermínio Diogo (IST)
Maria da Conceição Mesquita (IST)

Composição de textos e Paginação
Paulo Fernandes

Execução Gráfica
FNAC Gráfica, SA
Avenida dos Cavaleiros, Lote 1, Portela da Ajuda
1495 LISBOA
Telefone: (01) 417 13 30 / 32 / 33
Telefax: (01) 417 13 34

Tiragem: 3600 exemplares

Preço avulso: 1500\$00
Assinatura anual - quatro números
5000\$00 (Continente, Açores, Madeira e Macau)
6000\$00 (Estrangeiro / via aérea)

Distribuição gratuita aos sócios da SPQ

Distribuição para as Escolas Oficiais a cargo
da Direcção-Geral dos Ensinos
Básico e Secundário (DGEBS)

As colaborações assinadas são da exclusiva
responsabilidade dos seus autores, não vinculando
de forma alguma a SPQ, nem
a Direcção de «Química».
São autorizadas e estimuladas todas
as citações e transcrições, desde que seja indicada
a fonte, sem prejuízo da necessária autorização
por parte do(s) autor(es) quando se trate
de colaborações assinadas.

A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração
são publicadas anualmente no número de Janeiro.

Publicação subsidiada pela Junta Nacional
de Investigação Científica e Tecnológica
e pelo Ministério da Educação

	3	notícias
	7	notícias SPQ
	9	notícias IUPAC
	14	opinião
O triângulo «estruturas - financiamento - - avaliação» na investigação científica e tecnológica	16	artigos
J. LOPES DA SILVA		
Breve Reflexão sobre os últimos 25 anos da Indústria Química em Portugal	20	
CLEMENTE PEDRO NUNES		
A Química da Cortiça: ponto da situação	25	
LUÍS MANUEL C. C. GIL		
Química e Arqueologia: os isótopos de oxigénio e a reconstrução do clima	29	
A. J. C. CRUZ		
Ambiente: A nova atitude e o desenvolvimento sustentável	34	
PAULO BAPTISTA		
O primeiro espectro das protuberâncias solares	44	
M. N. BERBERAN E SANTOS		
Por trás do artigo de Química	54	ensino
R. HOFFMANN		
O "Satis 16-19: Science and Technology in Society"	57	técnicas experimentais
MARIANA P. PEREIRA		
Cromatografia	63	novos produtos
JOÃO COSTA PESSOA		
Análise do Programa Spec20	67	software
J. P. LEAL e M. J. MATOS		
[Ni(P-t-Bu) ₆]	69	moléculas
Uma curiosa molécula do ponto de vista estrutural	71	livros
M. J. CALHORDA		

NOVA IMAGEM DA SPQ



A Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) adoptou um novo logotipo/símbolo, criado pelo *designer* Luís Moreira, responsável pelo grafismo de "Química" e da "Revista Portuguesa de Química". O novo símbolo continua a ser constituído por três retortas - utensílio clássico de laboratório químico -, mas agora numa forma mais estilizada, perceptível e moderna.

Do mesmo modo o logotipo da SPQ foi também alterado de modo a conferir uma unidade gráfica global à imagem da SPQ. Estas alterações constam de um Manual de Normalização Gráfica, elaborado com o objectivo de criar parâmetros e regras de aplicação da nova imagem da SPQ.

Não ande com a cabeça às voltas!!!

COMPONENTES UHV
ANÁLISE TÉRMICA
EPITAXIA
ESPECTROFOTÓMETROS DE UV-VIS
POROSÍMETROS
ESPECTROFOTOMETRIA FT-IR
ANÁLISE DE SUPERFÍCIES
MICROSCOPIA SEM/TEM
APARELHOS PARA ENSAIOS DE MATERIAIS
ESPECTRÓMETROS DE RAIOS-X
ESPECTROFOTOMETRIA DE ABSORÇÃO ATÓMICA
X-RAY FLUORESCÊNCIA
ANALISADORES C13, N15
MICROSCOPIA ELECTRÓNICA ANALÍTICA
SUPERCRÍTICA
ANALISADORES DE PARTÍCULAS
ANALISADORES ELEMENTARES
ACESSÓRIOS PARA CROMATOGRAFIA
MICROSCÓPIOS VIDEO
MICROSONDAS
ESPECTROMETRIA DE MASSA
ROBOTIZAÇÃO
ANALISADORES DE TENSÕES
EQUIPAMENTO PARA PREPARAÇÃO DE AMOSTRAS
MICROSCÓPIOS SFM - STM
ANALISADORES DE SUPERFÍCIE
CROMATOGRAFIA IÓNICA
CROMATOGRAFIA GASOSA
ESPECTROMETRIA DE EMISSÃO (FAÍSCA, ICP, GD/L)
CROMATOGRAFIA LÍQUIDA

Contate!



DIAS DE SOUSA LDA
INSTRUMENTAÇÃO ANALÍTICA E CIENTÍFICA

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 15, R/C - 2625 PÓVOA DE STA. IRIA - TEL. (01) 9592316, 9592409 - FAX (01) 9590813
RUA GONÇALO CRISTÓVÃO, 294, 7.º ET, 4000 PORTO - TEL. (02) 31 08 39, 208 24 90 - FAX (02) 32 35 73
CANADA DOS FOLHADAIS, N.º 15 - 9700 ANGRA DO HEROÍSMO - AÇORES - TEL. (095) 3 25 12 - FAX (095) 3 13 38

Químicos do ITQB/UNL recebem Prémio Gulbenkian

O Prémio Gulbenkian de Ciência e Tecnologia de 1992, destinado ao domínio das Ciências Aplicadas e Tecnologias foi atribuído ao trabalho "Resolução enzimática de misturas racémicas em solventes não-convencionais", da autoria de Manuel Nunes da Ponte, Susana Filipe Barreiros, João Francisco R. S. Martins, Teresa Correia Sampaio Melo e Inês Borges Carvalho.

Os premiados realizaram o seu trabalho de investigação no Instituto de Tecnologia Química e Biológica da Universidade Nova de Lisboa.

O Júri reconheceu a originalidade do trabalho de investigação desenvolvido, realçando, para além da criatividade evidenciada, o rigor posto por esta equipa na actividade de investigação.

Manuel Nunes da Ponte, doutorado em Engenharia Química pela Universidade Técnica de Lisboa em 1977, é actualmente Professor Catedrático da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa. É membro da União Internacional de Química Pura e Aplicada e ainda delegado nacional ao Comité Técnico Ad-Hoc sobre Química do Programa COST da Comunidade Europeia. Ao longo da sua carreira, dedicada à investigação e à docência, publicou numerosos trabalhos científicos e artigos em revistas da especialidade. É coordenador de um grupo de investigação que inclui 12 investigadores. Susana Filipe Barreiros, doutorada em Química Física pela Universidade

Nova de Lisboa em 1987, é presentemente Professora Auxiliar na Faculdade de Ciências e Tecnologia da U.N.L.. Publicou vários trabalhos e artigos em revistas científicas, sendo neste momento responsável pelos trabalhos de doutoramento de diversos licenciados que colaboram em actividades de investigação.

João Francisco R. S. Martins, licenciado em Engenharia Química pelo Instituto Superior Técnico em 1987, é actualmente investigador no Instituto de Tecnologia Química e Biológica onde prepara a sua tese de doutoramento, sob a orientação de Susana Barreiros.

Teresa Correia Sampaio e Melo, licenciada em Química Aplicada/Biotecnologia pela Universidade Nova de Lisboa em 1992, realiza o trabalho de doutoramento no Centro de Tecnologia Química e Biológica também sob a orientação de Susana Barreiros.

Inês Borges Carvalho, licenciada em Química Aplicada/Biotecnologia pela Universidade Nova de Lisboa em 1992, realiza um estágio no Centro de Tecnologia Química e Biológica sob a orientação de Susana Barreiros onde colabora nas actividades correntes de investigação.

O Júri do Prémio, de acordo com o Regulamento, foi composto por individualidades indicadas pela Fundação, pelos Organismos de Administração Pública e pela Academia das Ciências.

Refinamento do valor da constante de Avogadro

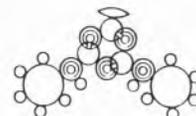
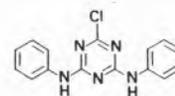
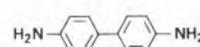
No relatório anual de 1992, o Centro de Investigação Conjunta das Comunidades Europeias (JRC) apresenta para a constante de Avogadro o valor mais preciso obtido até hoje: $N_A = (6.022134 \pm 0.000001) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$. O valor recomendado pela IUPAC, e baseado na recomendação CODATA 1986 é, recorda-se, $N_A = (6.0221367 \pm 0.0000036) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$. A mole é a unidade básica da grandeza "quantidade de matéria", adoptada pela IUPAC em 1969.

Para ovos e castanhas

assadas, por exemplo, a unidade básica usual é a dúzia. Mas como qualquer porção macroscópica de matéria contém um número elevadíssimo de átomos ou moléculas, para estes a unidade prática de quantidade é muito maior. Por isto, e por razões históricas, define-se a mole como o número de átomos contidos em 12 g de carbono-12. Este valor é de aproximadamente 6.02213×10^{23} , como se referiu. Sendo definido operacionalmente, tem necessariamente uma incerteza associada.

Loschmidt e o sonho de Kekulé

C. R. Noe e A. Bader (*Chem. Brit. Fev. de 93, p. 126*), apresentam evidência histórica para que a estrutura cíclica do benzeno tenha sido avançada em primeiro lugar por Loschmidt (químico-físico austríaco conhecido pela sua estimativa da constante de Avogadro) em 1861, e não por Kekulé em 1865, como é geralmente aceite (veja-se contudo J. Calado, *Anéis, Valsas e Carrocéis, Bol. Soc. Port. Quím. 28* (1987) 9). Mais ainda: Kekulé, a ter realmente sonhado com a serpente que morde a própria cauda (ou com uma ciranda de macacos, como foi versão posterior), estava provavelmente a recordar-se da obra de Loschmidt "Fórmulas de constituição da Química



Orgânica" (1861). Nesta obra, que Kekulé conhecia, pois numa carta a Erlenmeyer (1862) refere-se-lhe pejorativamente como "Fórmulas de Confusão", aparecem já estruturas de aromáticos, incluindo um heterociclo e o próprio benzeno. A sua modernidade é surpreendente (figura). Para além de apresentar estruturas espaciais, essencialmente correctas, são pela primeira vez representadas ligações duplas e triplas.

XVIII Reunião Ibérica de Adsorção Lisboa, 22, 23 e 24 de Setembro de 1993

Na sequência das Reuniões Ibéricas de Adsorção que têm vindo a realizar-se anualmente desde 1976 esta reunião tem lugar pela segunda vez em Lisboa, agora no edifício do Museu da Universidade de Lisboa, antigas instalações da Faculdade de Ciências, na R. da

Escola Politécnica, n.º 58.

Nos moldes das reuniões anteriores serão considerados temas de adsorção física, adsorção química e aspectos fundamentais e aplicados da adsorção em geral.

Os conferencistas convidados são o Prof. J. Roquerol,

director do "Centre de Thermodynamique et de Microcalorimétrie - CNRS", Marselha, o Doutor A. Paniego, chefe da "Unidad de Química Física de Interfaces del Instituto de Q. F. Rocasolano - CSIC", Madrid e Prof. P. Grange da "Université Catholique Louvain - Unité de

Catalyse et Chimie des Matériaux Divisés", Lovaina.

Para mais informações contactar a Prof. M. Brotas de Carvalho, XVII Reunião Ibérica de Adsorção, Dep. de Química, Fac. de Ciências de Lisboa, R. da Escola Politécnica, 58, 1200 Lisboa, Tel. (01) 608932.

3º Workshop Técnico do Projecto QUASIMEME

Vai realizar-se no Hotel Alvor, em Portimão, entre os dias 26 e 31 de Outubro de 1993, o 3º Workshop Técnico do Projecto QUASIMEME (Quality Assurance of Information for Marine Environmental Monitoring in Europe).

O QUASIMEME é um projecto de colaboração entre laboratórios que enviam os seus dados analíticos para programas internacionais de monitorização marinha (OSPARCOM, HELCOM, MEDPOL, ICES Baseline Studies), financiado pelo BCR (Gabinete

Comunitário de Referência) da Comunidade Europeia.

O objectivo deste projecto piloto é o melhoramento da qualidade de informação e da qualidade das medições dos dados enviados para estes programas.

Para mais informações, contactar a Comissão Organizadora: Teresa Vinhas, Paula Viana, Graça Noronha, Direcção Geral do Ambiente, Av. Almirante Gago Coutinho, 30-2º, 1000 LISBOA, Tel. 8470080, Fax: 8473001.

I Semana Europeia de Química

A I Semana Europeia de Química realiza-se de 15 a 20 de Novembro do corrente ano em Nápoles (Itália), organizada pela Universidade de Nápoles (Departamento de Engenharia de Materiais e de Produção), em colaboração com a Fundação IDIS e o Laboratório de Investigação Educativa da Universidade de Florença.

O objectivo desta iniciativa é contribuir para a compreensão da importância da Química na

vida quotidiana, paralelamente à promoção de uma ampla troca de opiniões e ideias sobre as fronteiras entre a investigação e as tecnologias inovadoras no âmbito da Química. O tema genérico da I Semana da Química é "A Química como uma ciência viva".

Para mais informações e esclarecimentos, contactar o Laboratório Ricerca Educativa, Dip. Chimica, Università Fireze, Via Maragliano, 77, I-50144 Firenze, Itália.

Encontro internacional sobre Engenharia Química

Achema 94

Realiza-se de 5 a 11 de Junho do próximo ano em Frankfurt am Main (Alemanha) o "International Meeting on Chemical Engineering and Biotechnology" (ACHEMA 94).

Este certame, cujo programa definitivo será divulgado na Primavera do próximo ano, é promovido pela "Deutsche

Gesellschaft für Chemisches Apparatewesen, Chemische Technik und Biotechnologie" (Dechema).

Para mais informações e esclarecimentos, os interessados deverão contactar directamente a organização: DECHEMA e.V., Postfach 150104, D-6000 Frankfurt am Main 15 - Alemanha.

Eurographics 93 no Algarve

A primeira Conferência Internacional de Educação Gráfica (Eurographics 93) vai realizar-se de 6 a 10 de Dezembro no Alvor (Algarve). Paralelamente, decorre a "Compugraphics 93" (3ª Conferência Internacional sobre Técnicas de Computação Gráfica e Visualização).

Estas duas iniciativas são da responsabilidade da Secção

de Métodos Gráficos do Departamento de Engenharia Civil do Instituto Superior Técnico (IST) de Lisboa.

Os interessados em participar ou em apresentar comunicação deverão contactar até 17 de Setembro aquele departamento do IST (Av. Rovisco Pais, 1 - 1096 Lisboa Codex ou através do tel/fax: 01-848 24 25).

Centro UNED de Cádiz Curso de Química Oceanográfica 1993-94



O Curso por correspondência de Química Oceanográfica decorrerá entre 1 de Dezembro de 93 e 20 de Maio de 94. É destinado a Licenciados em Ciências Experimentais. A matrícula poderá realizar-se até 15 de Outubro próximo. O curso constará de

quatro exames por correspondência, bem como de um trabalho monográfico, de um trabalho experimental e de um exame final, estes dois últimos no Centro UNED mais próximo do local de residência. Os alunos aprovados receberão o respectivo diploma, passado pela Universidad Nacional a Distancia (Centro de Cádiz). Para mais informações, contactar a Secretaria do Centro UNED (Plaza de S. Antonio 2, 11002 Cádiz, Espanha, Fax 212306).



Equipamento de Laboratório

Balanças - Centrífugas - Aparelhos de pH
Tituladores - Condutímetros - Agitadores
Espectrofotómetros - Microscópios - etc.

Vidros e Plásticos de Laboratório

Distribuidores NORMAX

Material Didáctico

Ensino Secundário e Superior
Representantes exclusivos
SISTEDUC - Sistemas Educativos S.A.

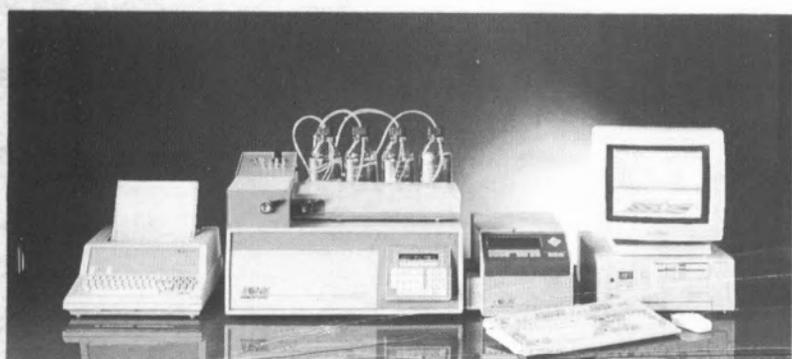
Rua Soeiro Pereira Gomes, 15 r/c Frente
Bom Sucesso - 2615 Alverca
Telefs. (01) 957 04 20/1/2 - Fax (351-1-957 04 23) - Portugal



KONIK-HRGC - 3000 C com «Head Space» dinâmico.

● **MODULARIDADE TOTAL**

Garantia de crescimento, modernização permanente.



KONIK-HPLC - 500 B com detector de varrimentos espectrais.

● **VERSATILIDADE**

Sistemas isocrático, de gradientes, semipreparativo, biocompatível... uma configuração adequada para cada necessidade analítica.

● **AUTOMATIZAÇÃO TOTAL**

Controle de módulos externos, comutação de colunas, etc. através do microprocessador.

● **REDUZIDA MANUTENÇÃO**

Garantia de elevado tempo útil de funcionamento.

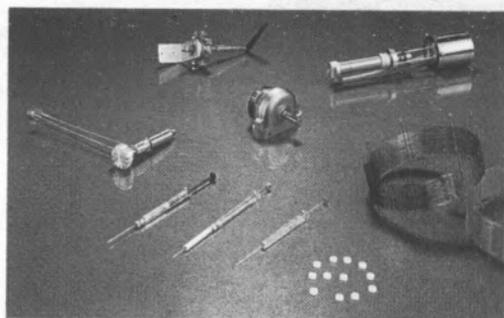


SOFTWARE DE INTEGRAÇÃO

com opção para «upgrade» de integradores.

● **APOIO TÉCNICO E ANALÍTICO**

Otimização de métodos analíticos, treino e especialização constante de utilizadores. Consultoria permanente. Laboratório de Aplicações. Serviço técnico com treino constante em fábrica.

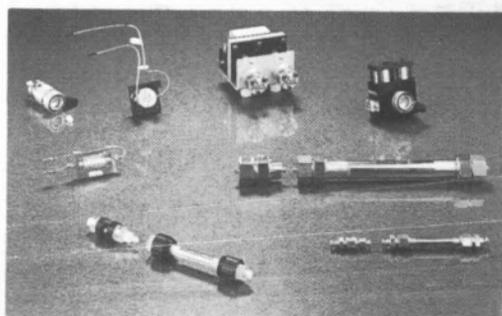


ACESSÓRIOS PARA CROMATOGRAFIA DE GASES.

Colunas especiais:

- Gás natural e petróleo
- Meio ambiente (EPA)
- Gases permanentes

Seringas, filtros, septos, colunas,...

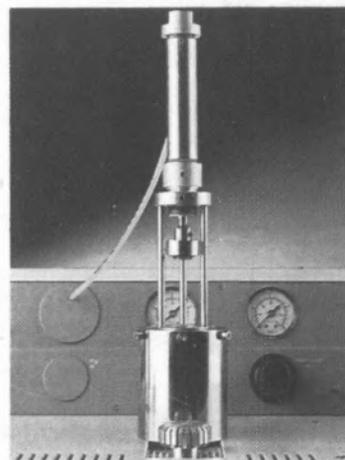


ACESSÓRIOS PARA CROMATOGRAFIA HPLC

Colunas especiais:

- Triglicéridos
- Drogas básicas
- Meio ambiente (EPA)
- Quirais

Seringas, filtros, pré-colunas, colunas,...

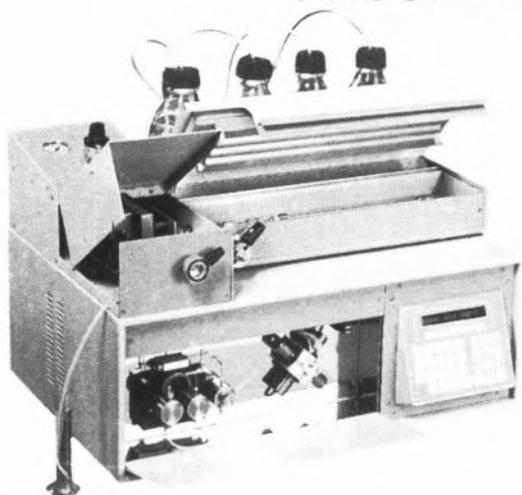


KONIK «HEAD SPACE» ESTÁTICO.

● **GAMA COMPLETA DE PERIFÉRICOS**

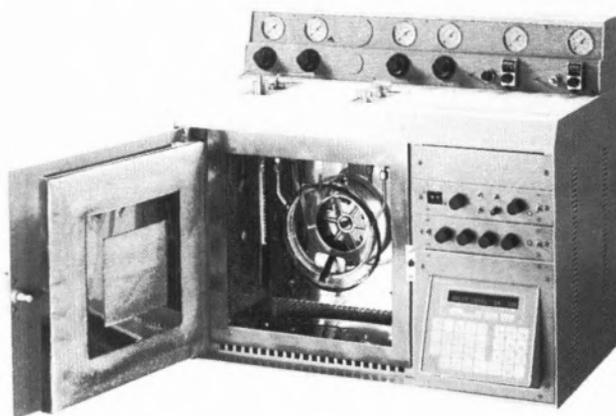
Detectors, tratamento de dados, acessórios e consumíveis.

PROGRAMA DE CROMATOGRAFIA



KONIK HPLC 500 B

- **ELEVADAS PRESTAÇÕES**
Bomba isenta de pulsações e reprodutibilidade de fluxo.
- **CAMARA DE AUTOLAVAGEM DE PISTOES**
Protecção adicional contra a precipitação salina da fase móvel.
- **SISTEMA DE DESGASIFICAÇÃO**
A solução definitiva para o problema de formação de bolhas no eluente.
- **FORNO NA VERSÃO STANDARD**
(Modelos de gradientes). Optimização e reprodutibilidade de análise.
- **GRADIENTES QUATERNARIOS**
O sistema mais versátil, potente e eficaz para formação de gradientes.
- **SISTEMA DE PURGA E AUTO-FERRAGEM DA BOMBA**
Economia de tempo e solventes.
- **GAMA COMPLETA DE SISTEMAS DE INJECCÃO**
Standard, microbore, automático, biocompatível.
- **CAPACIDADE DE PROGRAMAÇÃO**
Todos os parâmetros, todos os métodos, em memória não-volátil.



KONIK HRGC 3000 C

- **CONFIGURAÇÃO BICANAL**
Configuração e controle independente para dois conjuntos: injeção, coluna, detecção.
- **FORNO DE ELEVADAS PRESTAÇÕES**
Mínima inércia, máxima estabilidade térmica. Elevada velocidade de aquecimento, mínimo tempo entre análises.
- **PROGRAMAÇÃO DE TEMPERATURA**
Cinco rampas de temperatura garantem a máxima resolução em cromatografia capilar.
- **SISTEMAS DE INJECCÃO**
Optimizados para as distintas colunas e amostras: capilar multimodo, on-column, convencional, com loop de injeção, etc.
- **CONTROLE DE PURGA DE SEPTO**
Injector capilar de pressão constante com purga de septo programada. Garantia de uma perfeita injeção.
- **GAMA COMPLETA DE DETECTORES**
Gerais, FID, TCD, Selectivos: ECD, NPD, FPD, HECD, MSD.
- **PROGRAMAÇÃO**
Por meio de um display alfanumérico. Armazenamento de métodos em memória alimentada por bateria.
- **PROTECCÃO**
Programação de temperatura máxima de coluna com autodesconexão automática.

NÃO SE CONFORME COM MENOS!!

A MELHOR OPÇÃO EM GC!!

CENTROS KONIK DE FORMAÇÃO, SERVIÇO E VENDAS

EUROPA

Konik Instruments, S.A.
Rua Conde Redondo, 13-A-CV
1100 Lisboa (PORTUGAL)
Tel. (01) 57 57 87
Fax (01) 57 58 47

Konik Instruments, S.A.
World Trade Center Porto
Av. da Boavista 1277/81
- Piso (-3)/CP3
4100 Porto (PORTUGAL)
Tel. (02) 606 88 55
Fax (02) 600 21 35

Konik Instruments, S.A.
Ctra. de Cerdanyola, 65-67
08190 Sant Cugat del Vallès
Barcelona (ESPAÑA)
Tel. (93) 674 32 50
Fax (93) 674 41 50

AMÉRICA

Konik Instruments S.A.
6065 N.W. 167th St. BLDG B-20
MIAMI-FLORIDA 33015
(EUA)
Tel. (305) 557-2212
Fax (305) 556-4721

Konik Sudamericana, S.A.
H. de la Quintana, 1450-1454
1602 FLORIDA Buenos Aires
(ARGENTINA)
Tel. (1) 791 00 20 - 797 81 05
Fax (1) 791 02 62



Comissão Editorial da Revista Portuguesa de Química

Está já definida a composição da Comissão Editorial da Revista Portuguesa de Química. A sua constituição é a seguinte: Carlos F. G. C. Geraldès (FCT-UC), José Luís da Costa Lima (FF-UP), Carlos Crispim Romão (ITQB), Carlos Corrêa (FC-UC),

José M. G. Martinho (IST), Lélío Q. Lobo (FCT-UC), José J. Cruz Pinto (UM), José A. N. Ferreira Gomes (FC-UP), Fernando J. S. Pina (FCT-UNL) e Fernanda Madalena de Abreu da Costa (FC-UL). O primeiro número da RPQ deverá sair ainda este ano.

Presidente da Divisão de Química-Física

Em reunião da Divisão de Química-Física, realizada no IST, durante o I Encontro de Química-Física, foi eleito Presidente da

Divisão (1993-95) o Dr. José A. N. Ferreira Gomes, professor catedrático da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.



Novo Presidente da Delegação Regional de Coimbra: LUÍS G. ARNAUT

Tem 32 anos. Licenciou-se em Química pela Universidade de Coimbra em 1983, doutorou-se em Química também pela Universidade de Coimbra em 1988 e efectuou trabalhos de pós-doutoramento na University of Texas at Dallas em 1988/89. Actualmente exerce funções de Professor Auxiliar no Departamento de Química da FCTUC.

Tem desenvolvido actividade de investigação nos domínios da fotoquímica e reactividade química. Publicou cerca de duas dezenas de trabalhos científicos em revistas internacionais. É co-editor de um livro no domínio da sua especialidade, publicado pela Kluwer, e é editor convidado de um número do *Journal of Photochemistry and Photobiology*.

Eurochemist: Abertura de candidaturas ao título de Químico Europeu

A Sociedade Portuguesa de Química recebe até ao dia 10 de Outubro candidaturas ao título de "Eurochemist" (ano de 1994).

Podem solicitar este título:

1) Sócios da SPQ.

2) Sócios de outra Sociedade de Química membro do European Communities Chemistry Council, desde que residentes e exercendo actividade profissional em Portugal.

Os candidatos deverão ter um mínimo de oito anos de ensino pós-secundário, incluindo um mínimo de três anos de pós-graduação e experiência profissional reconhecida.

Para formalizarem o pedido os candidatos devem entregar na Sede da SPQ:

- Formulário de candidatura devidamente preenchido
- Curriculum vitae e proceder ao pagamento de 25 mil escudos.

As candidaturas, depois de analisadas por um júri nacional, serão submetidas ao júri europeu que tomará a decisão final. No caso de rejeição da candidatura, a SPQ reterá da verba acima indicada 5 mil escudos, devolvendo o restante ao candidato.

Os formulários de candidatura e restante documentação encontram-se para consulta na Sede da SPQ, Av. da República, 37-4º, 1000 Lisboa.

J. Lopes da Silva
Presidente do Júri Nacional

Encontro dos Presidentes das Sociedades de Química em Coimbra

O 14º Encontro dos Presidentes de Sociedades de Química vai realizar-se nos dias 13 e 14 de Agosto na cidade de Coimbra.

Entre os temas em análise, incluem-se a capacidade de intervenção nas decisões gover-

namentais por parte das Sociedades nacionais e internacionais de Química, as Relações entre Química e Sociedade, Cultura Humanística e Científica, e o papel da Química na construção de um mundo menos poluído.

FECS

Realizou-se no dia 3 de Junho, em Bruxelas, a Assembleia Geral da FECS (Federation of the European Chemical Societies). Para além da atribuição do prémio especial da FECS ao Prof. G. Jommi (Itália) e dum título de "Honorary Life President" ao Prof. W. Fritsche (Alemanha), pelos serviços prestados, aprovaram-se os relatórios dos grupos de trabalho (WP, Working Parties), e a acta da reunião anterior, tendo-se apreciado outros pontos da ordem de trabalhos, de entre os quais se destacam os seguintes:

- Criação dum European Advisory Board para avaliar os riscos dos produtos químicos, aconselhar e definir linhas de actuação a nível político na CE. Na sequência da actuação dum grupo semelhante no âmbito da Sociedade Química Alemã, foi considerada de interesse a participação da FECS (em conjunto com o ECCC, por ser um assunto específico da CE), juntamente com um grupo representativo da indústria (CEFIC, Conseil Européen des Federations de l'Industrie) e a Comissão Europeia.

- Eleição, por unanimidade, de três novos membros do Conselho da FECS, por um triénio. Entre eles conta-se, em representação da SPQ, o Prof. Ribeiro da Silva, da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.

- Colaboração da FECS com a Euchem, através da presença dum observador da FECS nas reuniões da Euchem.

- Proposta da criação duma medalha da FECS, aceitando-se sugestões sobre qual o

tipo de medalha e forma de atribuição, periodicidade, quantia, patrocinadores.

- Discussão das colaborações com IUPAC, FACS, ECCC, Federação das Sociedades de Engenharia Química. O observador da IUPAC referiu as actividades desta e mostrou algumas das suas publicações (textos científicos e outros sobre nomenclatura).

Esteve presente ao início da reunião o Dr. Fasella da DGXII da CE, que falou sobre a necessidade de encontrar "referees" idóneos para avaliação de projectos comunitários e evitar que o grupo actual se torne vitalício, com os males daí decorrentes. Pediu que a FECS (através das Sociedades de Química) colaborasse nesta busca, em particular nos países da Europa de Leste, onde é mais difícil, devido a circunstâncias políticas, uma definição objectiva do valor científico real dos cientistas. Referiu os projectos existentes para financiamento em áreas relacionadas com a Química (tecnologias genéricas, ambiente, energia, "Human Capital and Mobility") e a tentativa que está a ser feita de simplificação da burocracia, aconselhando a apresentação de candidaturas, apesar da taxa de sucesso ser de 1:10. Dum modo geral, foi considerada extremamente importante a actuação dos químicos como grupo, de modo a, em conjunto com a indústria, tentarem influenciar a nível da CE as decisões políticas que os afectam. O Prof. Fuks ofereceu à SPQ um livro focando este tema.

M. J. Calhorda



Ciência através da Europa (Science across Europe)

Um novo auxiliar para o ensino das ciências

Um novo projecto curricular para o ensino das ciências foi lançado em Bruxelas em Maio. Trata-se do projecto *Ciência através da Europa — assuntos chave para a sociedade*. Foi desenvolvido nos últimos três anos por uma equipa de professores europeus, em ligação com a Association for Science Education (UK) e os serviços de educação da BP. É um projecto pioneiro em educação, promovendo o estudo da ciência por meio da permuta de informação entre escolas de diferentes países e fomentando a dimensão europeia na educação. As escolas interessadas em participar ficam inscritas numa base de dados do projecto que inclui actualmente 260 escolas em 25 países situados na Comunidade Europeia, na Hungria, na Polónia, na Rússia e na Eslovénia. Em Portugal há 24 escolas inscritas, embora se saiba que o projecto é utilizado ainda noutras escolas. Espera-se ter a possibilidade de envolver mais de 2000 escolas até ao fim de 1994.

Este projecto compreende unidades didácticas, cada uma sobre um assunto, com informação científica básica, mapas, dados e indicações para o pro-

fessor. No estudo das unidades do projecto, os alunos de uma dada escola recolhem informações junto de fontes locais, realizam experiências e analisam documentos; a seguir, enviam-nas para outras escolas. Outra tarefa para os alunos realizarem consiste em prever tendências; isto dá-lhes a oportunidade de debater questões relativas a mudanças de estilo de vida que ocorrerão no futuro. De facto, muitos dos assuntos, como o fornecimento da energia, a qualidade da água e a chuva ácida constituem uma preocupação comum na comunidade e são aspectos frequentemente focados nos currículos de ciências dos diferentes países.

Um aspecto singular deste projecto é a possibilidade de receber e enviar informação a outras escolas na Europa. Por exemplo, os alunos em Portugal podem aprender, em primeira mão, o que se passa na Suécia sobre chuva ácida, por exemplo — e vice-versa. O registo central das escolas participantes contém dados sobre a idade, o nível em ciência dos alunos e a altura do ano escolhida para o estudo da unidade respectiva. Estes dados são fornecidos às diferentes

escolas inscritas, permitindo aos alunos permutar informação e comparar os diferentes componentes de cada actividade.

CIÊNCIA ATRAVÉS DA EUROPA

Cada uma das cinco unidades está disponível em 10 línguas da comunidade, incluindo o português. Com esta característica, o projecto oferece como utilização adicional a possibilidade de os alunos realizarem trabalhos em diferentes línguas. Este aspecto é de particular relevância no ensino de línguas, que decorre, por vezes, em equipas de professores de ciências e de línguas, e até em ligação com os de geografia.

Segundo a Comissão Europeia, "O projecto *Ciência através da Europa* constitui um exemplo de trabalho conjunto da educação e da indústria, numa perspectiva de ampliação do conhecimento das crianças através da comunidade e para além dela".

As unidades disponíveis tratam de assuntos como a utilização de energia em casa, a chuva ácida, a energia renovável, a água que bebemos e o que comemos.

• *A utilização de energia em casa* considera as fontes de energia utilizadas no aquecimento e na cozinha e a produção de energia.

• *A chuva ácida* analisa o problema da chuva ácida.

• *A energia renovável* investiga fontes de energia renováveis em pequena escala e em larga escala na região.

• *A água que bebemos* refere-se às impurezas que podem existir na água que bebemos, como chegam à água e como podem ser removidas.

• *O que comemos* foca os aspectos nutricionais da alimentação e as ligações entre alimentação, dieta alimentar e saúde.

O projecto introduz uma dimensão europeia na educação, através do estudo de temas de ciências. Respeita as tradições nacionais e, simultaneamente, abre aos alunos um vasto campo de diferentes perspectivas e estilos de vida. Foi desenvolvido por uma equipa multinacional de professores e tem o apoio do pessoal da BP de 10 países europeus.

Para informações adicionais contactar:

• Bob Moffat, European Marketing Consultants, Tel. 00-32-2-81 070 3033

• John Holman, Association for Science Education, Tel. 00-44-707 267 411; Fax 00-44-707 266 532

Andrew Harper/Jurgen Cuno, Gabinete de Imprensa da BP em Bruxelas, Tel. 00-32 3 774 3568

Mariana Pereira, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Tel. (1) 757 3141; Fax (1) 757 3624

Divisão de Educação

No dia 10 de Maio reuniu a Divisão de Educação da SPQ no edifício C1 da FCUL, conforme anunciado no último número do *Química*. Estiveram presentes, para além do Secretário-Geral da SPQ, o Presidente da Delegação da SPQ de Lisboa e alguns sócios.

Dado que o *Química* é enviado para as escolas, reafirma-se ser este veículo apropriado para os professores divulgarem, por exemplo: i) notícias de actividades realizadas ou a realizar com alunos, ii) sessões de acções de formação de professores, iii) relatos de trabalhos realizados, iv) comentários e/ou

sugestões relativos à implementação dos novos programas de Química, v) recensão de livros.

Salientou-se na reunião a inexistência de comunicação sobre actividades desenvolvidas noutros pólos e locais, pelo que se faz um apelo à divulgação e comunicação das mesmas no *Química*. Avançou-se a ideia da realização de uma reunião/encontro, com periodicidade bi-annual, a ter lugar em finais de Novembro, para coordenação e apresentação dos programas a efectuar por cada pólo ou local. Desta forma, verifica-se a necessidade de eleger o Presidente da Divisão de Educação. Esta activi-

dade fica, desde já, agendada para o próximo encontro da SPQ, a realizar em 1994, em Aveiro.

A Divisão de Educação aceitou ao pedido de colaboração nas Semanas de Ciência e Tecnologia organizadas pela Associação de Ciência e Tecnologia para o Desenvolvimento (ACTD). Assim esteve já presente na última semana, que decorreu no Porto de 29 de Maio a 6 de Junho de 1993. A SPQ colaborou com: i) painéis informativos sobre "O que é um químico", sobre segurança e sobre energia das moléculas e ii) uma compilação de protocolos de 14 experiências. Estas "Semanas" realizam-se de 6 em 6 meses, em localidades diferentes, e é necessário um maior grupo de trabalho para a sua realização. Os interessados em participar,

deverão contactar a Dr^a Mariana Pereira (Dep. Ensino - Fac. Ciências - Univ. Lisboa - Campo Grande - C1 - 3^o piso - 1700 Lisboa), ou a Dr^a Maria Helena Nascimento (Esc. Sec. da Parede - Lisboa). O material utilizado no Porto regressará à SPQ e as escolas interessadas na sua utilização/exibição poderão requisitá-lo.

A SPQ está a organizar um laboratório de demonstração de *software* educativo onde, para além da exploração do mesmo, se poderão criar formadores e animadores de futuras workshops a serem realizadas nas escolas. No presente momento, existe uma sala na SPQ onde se pode explorar os programas existentes e quem estiver interessado no desenvolvimento deste trabalho, contacte o Prof.



Doutor Eurico de Melo (tel: (01) 4410829/37).

A próxima reunião da Divisão de Educação ficou agendada para 21 de Julho às 17h30m, no pólo da SPQ na FC-UL, edifício C1, 5º piso. Para perguntas e sugestões, contactar Paulo Agostinho (Esc. Sec. Aquilino Ribeiro - Estrada de Talaíde - Leiria - 2780 Oeiras - tel: (01) 4420755).

OLIMPIADA DE QUÍMICA

Tal como tinha sido anunciado no último *Química* e também pelos pedidos chegados à Divisão de Educação, aqui ficam algumas informações sobre o modo como decorreu esta Olimpíada, as equipas vencedoras e uma estatística da mesma. Os enunciados das provas realizadas estão disponíveis para consulta na Sede. Serão remetidos aos interessados contra o envio de 500\$00. Numa primeira fase, etapa regional,

realizou-se uma prova de selecção entre as escolas participantes e pertencentes à mesma zona (CAE ou da SRE da Madeira ou Açores) onde existia uma Escola organizadora. As provas teóricas e as laboratoriais, bem como reagentes e material, instruções para professores para a realização da prova, quer para a sua correção, foram fornecidas pela Divisão de Educação. Durante a semana que antecedeu a prova, e o dia da mesma, houve a possibilidade de apoio permanente pelo telefone, de elementos da Divisão de Educação da SPQ. Nos quadros abaixo apresentam-se as informações referentes à Etapa Regional para ambos os níveis. Onde aparece um asterisco (*) significa que a Divisão não recebeu a(s) informação(s) da(s) escola(s) para a(s) completar.

A Etapa Nacional decorreu na Escola Secundária de Santa Maria de Sintra no dia 22 de Maio. É de salientar, mais uma vez, o grande empenho e disponibilidade humana de todo o

conjunto da escola organizadora. Estiveram presentes duas professoras coordenadoras, 9 professores de Física e Química, 10 professores vigilantes, 9 funcionários da escola e 6 alunos. Todas as equipas vindas de escolas de fora de Lisboa, tiveram direito a dormida e refeições, de acordo com o regulamento da Olimpíada.

A 1ª parte da etapa nacional teve início às 9h30 e a 2ª às 11h30. No mesmo período, para os professores acompanhantes houve uma conferência, proferida pelo Prof. Doutor Eurico de Melo sobre "A Química e a Fotografia", seguida de workshops sobre a exploração de software educativo. Durante a parte da tarde, teve lugar um passeio turístico por Sintra e arredores. Seguidamente houve a apresentação das provas extra-olimpíada que se diversificaram desde o teatro, às provas experimentais e a programas de computador. Na sessão de encerramento, em que foram entregues os prémios e os certificados de participação, esteve presente o Secretário Geral da SPQ, a Drª Teresa Oliveira, a Drª Maria da Graça, a presidente do Conselho Directivo da escola e alguns membros da Divisão de Educação.

Foram vencedoras as seguintes equipas:

Nível I - 1º lugar - Esc. Sec. José Falcão, Coimbra. "Os Joões";

João Maria Luís, João Pedro Neves e João Filipe Santos.

2º lugar - Esc. Sec. Rodrigues Lobo, Leiria. "Soquímicos"; Nuno Franco, Ricardo Spencer e Joana Cadima.

3º lugar - Esc. Sec. nº 2 do Seixal, Seixal. "Químicos... mas não muito"; Sónia Pereira, Nuno Gomes e João Pargana.

Nível II - 1º lugar - Esc. Sec. da Parede, Parede. "Radicais livres"; Vasco Silva, Maria Pena e Sónia Carvalho.

2º lugar - (em igualdade). Esc. Sec. Santa Maria de Sintra, Sintra. "Politetrafluoretileno"; Rafaela Cardoso, Soraia Marques e Tito Teixeira.

Esc. Sec. Jaime Moniz, Madeira. "Precipitados S. A.";

Na sequência da realização das provas, a Divisão de Educação vai constituir um grupo de trabalho para efectuar a análise das provas, no sentido de identificar a estruturação apresentada pelas equipas na resolução dos problemas propostos. Desta forma, quem estiver interessado deve contactar alguém da Divisão.

No quadro abaixo apresentam-se informações referentes ao número total de participantes da Etapa Nacional, para ambos os níveis.

Paulo Agostinho

	Nº de Esc. Presentes	Nº de Professores envolvidos		Nº de Alunos envolvidos	
		Feminino	Masculino	Feminino	Masculino
Nível I	17	16	1	24	27
Nível II	18	17	1	28	26

OLIMPIADAS DE QUÍMICA — ETAPA REGIONAL — NÍVEL I

CAE Nº	NOME DA CAE	Nº DE ESCOLAS	ESCOLA VENCEDORA	EQUIPA VENCEDORA	Nº DE PROFESSORES		Nº DE ALUNOS PARTICIPANTES		ESCOLA ORGANIZADORA
					FEMININO	MASCULINO	FEMININO	MASCULINO	
1	Viana do Castelo	1	Externato das Neves — Barrotes	ALDU-MXT	—	1	—	3	
2	Braga	5	Sec. Alcides de Faria	Azadas	6	1	3	12	Sec. Carlos Amarante
3	Porto	14	Sec. de Carvalhos	Os Quimioterapeutas	14	4	15*	20*	Sec. Infante D. Henrique
4	Vila Real	4	Sec. Latino Coelho	Einstein	3	1	2	10	Sec. Fernando de Magalhães
5	Bragança	1	Sec. Mogadouro	Os Electões	1	—	1	2	Sec. Emídio Garcia
6	Aveiro	4	Sec. Esmoriz	Os Cráneos	5	—	5	7	Sec. José Estevão
7	Coimbra	3	Sec. José Falcão	Os Joões	6	—	2	7	Sec. D. Dims
8	Castelo Branco	1	Sec. Nuno Álvares	Não me lembro	1	—	1	2	Sec. Nuno Álvares
9	Guarda	1	Sec. Afonso Albuquerque	Formigas Atómicas	1	1	3	3	Sec. Afonso de Albuquerque
10	Viseu	1	Sec. Alves Martins	A Incógnita	1	—	3	—	Sec. Alves Martins
11	Leiria	5	Sec. Francisco Rodrigues Lobo	Soquímicos	5	—	7*	5*	Sec. Francisco Rodrigues Lobo
12	Lisboa	10	Colégio St.ª Clara — Casa Pia	Triatomia	11	1	13	17	Sec. Afonso Domingues
13	Oeste	1	Sec. Raúl Proença	Espartanos	1	—	—	3	Sec. Madeira Torres
14	Lezíria	3	Sec. Jacome Ratton	Sulfato de Maluquice	6	1	3	6	Sec. Rio Maior
15	Portalegre	—	Não participou	—	—	—	—	—	Sec. Mouzinho da Silveira
16	Évora	1	Sec. Gabriel Pereira	Os Alquimistas	2	—	—	3	Sec. André Gouveia
17	Beja	—	Não participou	—	—	—	—	—	
18	Península de Setúbal	2	Sec. n.º 2 do Seixal	Químicos... mas não muito	5	—	2	4	Sec. n.º 2 do Seixal
19	Faro	—	Não participou	—	—	—	—	—	Sec. S. João de Deus
	Madeira	2	Sec. Jaime Moniz	Trio Laboratorial	4	2	*	*	Sec. Jaime Moniz
	Açores	—	Não participou	—	—	—	—	—	

OLIMPIADAS DE QUÍMICA — ETAPA REGIONAL — NÍVEL II

CAE Nº	NOME DA CAE	Nº DE ESCOLAS	ESCOLA VENCEDORA	EQUIPA VENCEDORA	Nº DE PROFESSORES		Nº DE ALUNOS PARTICIPANTES		ESCOLA ORGANIZADORA
					FEMININO	MASCULINO	FEMININO	MASCULINO	
1	Viana do Castelo	—	Não participou	—	—	—	—	—	
2	Braga	4	Sec. Sá de Miranda	Os Pipetas	6	—	3	9	Sec. Carlos Amarante
3	Porto	14	Sec. Carolina Michaelis	Os Avogadros	17	3	15	27	Sec. Infante D. Henrique
4	Vila Real	6	Sec. Latino Coelho	Os Arquimedes	6	1	8	10	Sec. Fernando de Magalhães
5	Bragança	4	Sec. Abade Baçal	Os Químicos	4	2	5	7	Sec. Emídio Garcia
6	Aveiro	3	Sec. n.º 1 de Ovar	Meticlicopentano	5	—	3	6	Sec. José Estevão
7	Coimbra	3	Sec. D. Dims	As Quatums	5	—	3	6	Sec. D. Dims
8	Castelo Branco	1	Sec. Nuno Álvares	*	1	—	3	—	Sec. Nuno Álvares
9	Guarda	—	Não participou	—	—	—	—	—	
10	Viseu	3	Sec. Alves Martins	Pitós-Ga	5	—	8	1	Sec. Alves Martins
11	Leiria	3	Sec. Francisco Rodrigues Lobo	Os Gasogéneos	4	—	7	2	Sec. Francisco Rodrigues Lobo
12	Lisboa	12	Sec. Parede	Radicais Livres	14	1	12	24	Sec. Afonso Domingues
			Sec. St.ª Maria de Sintra	Politetrafluoretileno	—	—	—	—	
			Sec. Rainha D. Amélia	Vila - No - Lab	—	1	2	1	Sec. Madeira Torres
13	Oeste	1	Sec. Raúl Proença	CFC	—	1	2	1	Sec. Madeira Torres
14	Lezíria	3	Sec. Rio Maior	Trípé	6	1	5	4	Sec. Rio Maior
			Sec. Jacome Ratton	Os explosivos	—	—	—	—	Sec. Mouzinho da Silveira
15	Portalegre	—	Não participou	—	—	—	—	—	Sec. André Gouveia
16	Évora	2	Sec. Gabriel Pereira	As Pipetas	3	1	4	2	Sec. André Gouveia
17	Beja	—	Não participou	—	—	—	—	—	
18	Península de Setúbal	3	Sec. Alfredo da Silva	ESAS	6	—	1*	2*	Sec. n.º 2 do Seixal
19	Faro	—	Não participou	—	—	—	—	—	Sec. S. João de Deus
	Madeira	4	Sec. Jaime Moniz	Precipitados S.A.	4	2	13	14	Sec. Jaime Moniz
	Açores	—	Não participou	—	—	—	—	—	



Novos Sócios Colectivos

De Março a Maio deste ano, fizeram-se sócios colectivos da SPQ as seguintes empresas: José Manuel Gomes dos Santos, Lda., E.N. - Equipamentos de Análise e Ensaio, Lda., LABOMETER - Sociedade Técnica de Equipamentos de Laboratório, Lda., SOTEL - Sociedade Técnica de Laboratório, Lda. e Biodinâmica, Biónica Aplicada, Lda.

A empresa José Manuel Gomes dos Santos dedica-se à comercialização de muitos produtos relacionados com o sector

laboratorial (reagentes, material de vidro, filtros, porcelanas, meios de cultura): E. N. por seu lado dedica-se especialmente à comercialização de equipamentos analíticos. A LABOMETER comercializa equipamentos de laboratório (investigação e controlo) para várias aplicações, nomeadamente nas áreas da Química. A SOTEL comercializa produtos laboratoriais e hospitalares e a Biodinâmica dedica-se ao fabrico e à comercialização de instrumentos científicos.

Divisão de Química Inorgânica 1ª Conferência de Química Inorgânica

Realizou-se nos dias 7 e 8 de Maio, em Águeda, a 1ª Conferência de Química Inorgânica, com o tema **Da Síntese à Mecânica Molecular. Aspectos Contemporâneos em Química Inorgânica**. A conferência teve larga participação em todas as sessões (estiveram presentes 100 participantes) e foram apresentadas 9 comunicações convidadas, 14 orais e 30 em forma de painel.

Na reunião da Divisão, que na altura se realizou, elegeram-se o Presidente da Divisão de Química Inorgânica para os próximos dois anos. Trata-se de Fernanda Madalena de Abreu da

Costa, da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. Decidiu-se, ainda, que as Conferências de Química Inorgânica se realizariam de dois em dois anos e que a próxima, em 1995, voltaria a ser na Região Centro do país com a mesma comissão organizadora, à qual se juntará a nova Presidente da Divisão. Considerou-se ainda muito importante que a Divisão dinamize um trabalho de tradução para português de termos de química inorgânica, que agora foi iniciado com os elementos químicos.

Rita Delgado

Grupo de Espectrometria de Massa 1º Encontro de Espectrometria de Massa

O 1º Encontro do Grupo de Espectrometria de Massa da Sociedade Portuguesa de Química vai ter lugar na Universidade de Aveiro nos dias 12 e 13 de Novembro de 1993.

Este encontro tem por fim proporcionar a reunião de todos os cientistas e técnicos portugueses que fazem investigação de iões gasosos ou são utilizadores da espectrometria de massa.

Estão previstas conferências plenárias, uma das quais pelo Prof. K. Jennings (Un. de Warrick, U.K.), comunicações convidadas e comunicações orais curtas.

Durante o encontro será feita a divulgação do mais recente equipamento de Espectrometria de Massa, adquirido através do Programa Ciência, instalado na Universidade de Aveiro, e no INETI em Sacavém.

Todos os pedidos de informações e de inscrição devem ser dirigidos a:

Prof. Maria Alzira Almos-ter Ferreira, Departamento de Química, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Campo Grande, Edifício C1, 5º piso - 1700 Lisboa. Tel. (01) 757 31 41 (ext. 2181) - Fax. (01) 757 94 04.

Novo Grupo da SPQ Grupo da Química dos Glúcidos

No dia 7 de Maio de 1993 realizou-se no Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa o Encontro "O Dia dos Glúcidos". Para além de ter demonstrado trabalhos desenvolvidos nas Universidades Portuguesas no âmbito da Química dos Glúcidos, este Encontro, que contou também com a participação de colegas franceses especialistas em Síntese Orgânica, permitiu concluir que o domínio dos Glúcidos despertou grande interesse nos estudantes e docentes de todo o país. Nele participaram docentes

das Universidades do Minho, da Beira Interior, de Aveiro, de Coimbra, Universidade Nova de Lisboa e Universidades de Évora e de Lisboa, tendo havido um total de 42 participantes neste Encontro.

O reconhecimento da investigação desenvolvida em Portugal sobre Glúcidos e o entusiasmo verificado pela adesão a esta iniciativa permitiu a criação do Grupo da Química dos Glúcidos, que conta à partida com 47 inscrições. Só nos resta desejar-lhe um futuro dinâmico e inovador!

A. Pilar Rauter

Grupo de Radicais Livres 1º Congresso de Radicais Livres em Química, Biologia e Medicina

Realizou-se de 21 a 23 de Junho de 1993, no Instituto Superior Técnico, o 1º Congresso de Radicais Livres em Química, Biologia e Medicina, numa iniciativa do Grupo de Radicais Livres da Sociedade Portuguesa de Química em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Radicais Livres.

O programa científico consistiu num primeiro dia de *Workshop*, onde foram proferidas seis lições sobre a química dos radicais livres e suas aplicações, seguindo-se dois dias de conferências plenárias (4), convidadas (14, orais) e de apresentação livre (45, em painel), nas áreas temáticas "Radicais Livres em Química e Engenharia Química", "Química-Física de Radicais Livres de Interesse Biológico", "Radicais Livres em Medicina" e "Radicais Livres em Biologia e Biofísica".

O Congresso teve a presença de cerca de 130 participantes (de entre os quais 5 estrangeiros, sendo 3 convidados), contando-se entre eles professores, investigadores e estudantes (de licenciatura, mestrado e doutoramento) das áreas científicas da Química, Engenharia Química, Bioquímica, Biofísica, Biologia e Medicina.

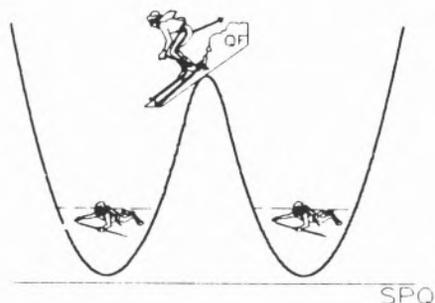
Os objectivos do Congresso, o encontro e intercâmbio de especialistas a nível nacional desta área pluridisciplinar da investigação científica, foram amplamente conseguidos, não só pelo número e diversidade dos participantes acima referidos, como pela sua presença assídua e atenta a todas as sessões de trabalho, e ainda pelas discussões animadas e participadas das várias comunicações apresentadas, sendo de prever um incremento futuro nas relações científicas na área dos radicais livres.

Dado o êxito alcançado com este 1º Congresso, o Grupo de Radicais Livres da Sociedade Portuguesa de Química, em reunião efectuada antes da conclusão dos trabalhos, propôs a realização de um 2º Congresso, que terá lugar na cidade do Porto em 1995 e cuja Comissão Organizadora será presidida pelo Professor Carlos Corrêa da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, coadjuvado pela Professora Mª de Lurdes Mira da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa e pelo signatário, bem como outros membros a designar, apelando-se desde já à participação de todos os interessados.

Abel Vieira



Divisão de Química-Física 1º Encontro de Química-Física



Decorreu no passado mês de Junho no Instituto Superior Técnico, durante três dias, o 1º Encontro de Química-Física.

Bem organizado, e cobrindo um grande número de áreas (Cinética Química, Dinâmica Molecular, Espectroscopia, Fotoquímica e Fotofísica, Macromoléculas, Propriedades de Transporte, Química-Física do Estado Sólido, Química-Física de Superfícies, Química Quântica e Mecânica Molecular, Termodinâmica Experimental) registou a adesão de cerca de 160 participantes. O programa científico consistiu em 2 conferências plenárias, 20 comunicações convidadas e 15 comunicações orais, para além de 62 comunicações em painel. O nível científico foi geralmente elevado, sendo os domínios mais representados a Termodinâmica Experimental e a Fotoquímica/Fotofísica. A pre-

sença de alguns oradores de áreas habitualmente consideradas como não pertencendo à Química-Física (Materiais, Física Molecular) foi decisão deliberada da Organização, como forma de salientar afinidades e promover colaborações. Da mesa-redonda realizada no final do Encontro, resultaram várias conclusões consensuais, como sejam as de: 1) prosseguir com o Encontro bianualmente, mas com uma duração de 2 dias; 2) realizar o Encontro fora de centros urbanos, como meio de favorecer contactos científicos mais eficazes; 3) Necessidade de apoiar a emergência de competências nacionais em áreas importantes mas pouco desenvolvidas ou inexistentes, como a Química Quântica e a Cinética de Fase Gasosa. As conferências plenárias e convidadas serão publicadas em volume próprio.

Divisão de Química Orgânica: Conferência de Derek Barton no IST

Como actividade inaugural da Divisão de Química Orgânica, realizou-se em Junho, no Complexo I do IST, uma conferência pelo Prémio Nobel da Química (1969) Sir Derek Barton, com o título "The invention of Chemical Reactions". Nela foi também projectado um filme sobre a vida e actividade deste

cientista de 74 anos.

Barton deu dois conselhos simples mas frequentemente esquecidos aos químicos mais novos: "não trabalhar no campo das coisas conhecidas" e "fazer apenas aquilo de que se gosta". No início da conferência foi-lhe atribuída a Medalha Ferreira da Silva pelo Vice-Presidente da SPQ.

VII Encontro Galego-Português de Química: "QUÍMICA E TECNOLOGIA DA ÁGUA"

VII ENCONTRO
GALEGO - PORTUGUES
DE QUIMICA

"QUIMICA Y
TECNOLOGIA
DEL AGUA"

EL AGUA SU MEJOR DESTINO

COLEGIO OFICIAL DE QUIMICOS
ANQUE DE GALICIA

SOCIEDAD PORTUGUESA DE QUIMICA
DELEGACION NORTE

Vigo, 25, 26 y 27 de Noviembre de 1993

1ª Circular

Prosseguindo a colaboração entre o Colégio Oficial de Química de Galicia, a Agrupación Territorial da ANQUE, e a Delegação Norte da SPQ, realiza-se em Vigo, de 25 a 27 de Novembro próximo o VII Encontro Galego-Português de Química, subordinado ao Tema "Química e Tecnologia da água", cobrindo os seguintes aspectos:

Gestão, Tratamento e Reutilização, Análise e Controle, Legislação.

Os interessados deverão contactar a *Secretaría del VII Encontro Galego-Português de Química*, Colégio de Químicos - ANQUE de Galicia, Urzáiz, 1-2º D, 36201 Vigo, Espanha ou Tel. (986) 437915, Telefax (986) 220681.



Grupo de Química Alimentar 1º Encontro de Química de Alimentos

Organizado pelo Grupo de Química Alimentar da SPQ, realiza-se de 19 a 22 de Dezembro de 1993, na Escola Superior Agrária de Santarém, o 1º Encontro de Química de Alimentos, cobrindo as seguintes áreas temáticas:

- 1) Ingredientes e aditivos
- 2) Embalagens na indústria alimentar
- 3) Análise e controle de qualidade
- 4) Investigação Fundamental na Química Alimentar e Nutrição
- 5) Transformação e processamento de alimentos
- 6) Produtos Alimentares de origem regional
- 7) Normalização, Quadro Legislativo actual e sua evolução
- 8) O futuro da Indústria Alimentar e a integração na CE

As línguas oficiais serão o Português e o Inglês, havendo possivelmente tradução simultânea. Realizar-se-ão Conferências



Plenárias, Conferências Convidadas, Painéis e um número limitado de comunicação orais seleccionadas de entre os resumos recebidos. O prazo limite para o envio dos resumos é 1 de Setembro de 1993.

Serão proferidas as se-

guintes Conferências Plenárias:

— Rice Quality Criteria for Processing and Consumption (C.B. de Barber, CSIC, Valência).

— Interactions of Industry and Academia for Food Research and Development (C. Mercier, BSN, Paris)

— Colloid Science and Some Directions for Food and Nutrition (P. Richmond, CWS Quality and Consumer Care, Manchester).

— Blood Lipids and Anthropometric Comparisons between selected portuguese and US populations (R. Burton, Harris-Stowe College, St. Louis).

— Organic Acids and Esters as Food Preservatives: Mechanisms of Action and Practical Applications (T. Eklund, Norwegian Dairy Association, Oslo).

Para mais informações, contactar:

Dr. Jorge Justino, Escola Superior Agrária de Santarém, Departamento de Química e Física, Apartado 310, S. Pedro, 2004 Santarém Codex; Tels. (043)22087/22088, Telefax (043) 20742.



Pure and Applied Chemistry

65 (2) (1993)

173

Plenary and Invited lectures presented at the 5th International Symposium on Solubility Phenomena held in Moscow, Russia.

231

Plenary lectures presented at the 10th International Conference on Computers in Chemical Research and Education held in Jerusalem, Israel.

259

Plenary and Invited lectures presented at the 4th International Seminar on Flame Structure held in Novosibirsk, Russia.

65 (3) (1993)

355

Plenary and Invited lectures presented at the Seventeenth International Symposium on Macrocyclic Chemistry held in Provo, Utah, USA.

65 (4) (1993)

595

Plenary and invited lecture presented at the 3rd International Conference on Heteroatom Chemistry held in Riccione, Italy.

731

Plenary lectures presented at the 16th International Carbohydrate Symposium held in Paris, France.

819

IUPAC Recommendations: Nomenclature for chromatography.

65 (5) (1993)

873

Main and Rossini lectures presented at the 12th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics held in Snowbird, Utah, USA.

1009

Nomenclature, symbols and definitions in electrochemical engineering (IUPAC Recommendations 1993)

1021

Analytical techniques for trace organic compounds - IV: Tandem mass spectrometry for organic trace analysis (Technical Report)

1029

Critical survey of the stability constants of complexes of aliphatic amino acids (Technical Report)

1081

Radionuclide migration in groundwaters: Review of the behaviour of actinides (Technical Report)

Spectro Analytical Instruments



Espectrómetros de emissão óptica por fonte de plasma (ICP) de elevadas performances analíticas, para análises simultâneas ou sequenciais de elementos em solução.

Possuem vários sistemas ópticos que possibilitam a determinação até 64 elementos (simultâneo) ou 15 elementos/min (sequencial), não necessitando de «procura de pico» (sequencial).

Aplicáveis em análises de águas, solos, hidrologia, alimentos, materiais orgânicos e inorgânicos.

EN - Equipamentos de Análise e Ensaio, Lda.
Porto: Telef. (02) 948 68 68, Fax (02) 948 61 32
Lisboa: Telef. (01) 352 72 93, Fax (01) 356 04 54

Biodinâmica

Biónica Aplicada Lda.

RUA DA GUINÉ, 2-2º E
1100 LISBOA-PORTUGAL
TEL. 815 07 60 — FAX 815 07 70

INSTRUMENTAÇÃO

HI-TECH SCIENTIFIC - Stopped Flow e instrumentação para estudos de cinética de reacções rápidas.

PHOTON TECHNOLOGY INTERNATIONAL (PTI) - Fontes de Radiação, Fluorímetros (estado estacionário e de tempos de vida), Lasers de Azoto com ou sem laser de corantes, Fluorescência de Rácio, software.

IBH - Tempos de vida, Lâmpadas pulsadas, Detecção ultra rápida (fotomultiplicadores e instrumentação), software.

OLIS - Espectrofotómetros clássicos modernizados. Monocromadores de Scanning Rápido (até 1000 scans/sec).

CANBERRA INDUSTRIES - Instrumentação nuclear, detectores de estado sólido, etc.

BROOKHAVEN INSTRUMENTS - Analisadores de tamanho de partículas por dispersão de luz,

centrifugação e electrocinética.

KINETIC SYSTEMS - Mesas e "breadboards" para óptica.

GENTEC - Medidores de energia para lasers.

LASER SHIELD - Óculos de protecção para radiação laser (Nd-Yag, CO₂, He-Ne), espectro largo e UV.

CORION - Gama completa de filtros ópticos.

STRAWBERRY TREE COMPUTERS - Placas e software para aquisição de dados.

HELLMA - Células (cuvettes) em vidro e quartzo.

Desenvolvimento e construção de instrumentação.

Exponha-nos as suas necessidades

O triângulo "estruturas-financiamento-avaliação" na investigação científica e tecnológica*

J. LOPES DA SILVA**

Estruturas, financiamento e avaliação são os vértices de um triângulo envolvente de toda a problemática da investigação científica e tecnológica. A indissociabilidade destes três temas implica que a abordagem de um deles tenha obrigatoriamente que ter em conta os outros dois. Assim, só faz sentido falar de avaliação referenciando-a a um dado tipo de estruturas e a uma dada opção de financiamento.

Para este efeito e sob a designação de estruturas engloba-se:

- tipo de unidade de investigação (Institutos, Centros, grupos);
- inserção estrutural (tutela, interdependências funcionais);
- pessoal permanente (investigador, técnico, administrativo, operário);
- infraestruturas de apoio à investigação (secretariado, bibliotecas, oficinas).

Nesta comunicação toma-se como unidade de referência o Centro, instituição constituída por grupos (células unitárias de qualquer estrutura de investigação) e dotada de algumas infraestruturas comuns aos diferentes grupos. Admite-se que num Centro podem colaborar investigadores de carreira e docentes universitários doutorados ou não, técnicos de investigação, bolsiros de pós-graduação e pós-doutoramento e algum pessoal administrativo.

O financiamento directo de uma unidade deste tipo não abrange o pagamento do pessoal permanente (a cargo do organismo de tutela) devendo apenas contemplar as verbas para:

1. funcionamento e manutenção básicos que asseguram a existência da unidade;
2. funcionamento, manutenção e bibliografia permitindo aos grupos desenvolver projectos sem recurso a novos equipamentos;
3. aquisição e manutenção de novos equipamentos;
4. bolsas de pós-graduação;
5. bolsas de pós-doutoramento.

Pressupõe-se que a atribuição das verbas se insere num contrato programa

de x anos a elaborar entre a entidade financiadora e o centro, decorrente da apresentação, por este último, de uma proposta descrevendo pormenorizadamente:

- os objectivos e as actividades a desenvolver no quadro de projectos de investigação a realizar por cada grupo;
- as verbas para o efeito solicitadas no âmbito de cada um dos cinco itens anteriores;
- súmula dos trabalhos anteriores e dos resultados obtidos.

As verbas de funcionamento e manutenção serão expressas em unidades de crédito sendo o valor de cada uma função do domínio de investigação, do tipo de investigação e nas referidas em 2 do resultado da avaliação.

Caracterizada a unidade de investigação, apresentada uma proposta concreta de projectos de investigação e definidos os vários níveis de financiamento está-se em condições de reflectir sobre avaliação, o que implica discutir quem a executa e como deve ser realizada.

Escolher quem avalia é sempre tarefa complexa mas é-o ainda mais num país pequeno, como Portugal, em que avaliador e avaliado se confundem frequentemente. Para minimizar estes inconvenientes afigura-se importante que as comissões de avaliação:

- sejam compostas por elementos nomeados pela entidade financiadora dos quais cerca de 1/3 sob proposta das unidades de investigação;
- tenham uma constituição periodicamente renovada;
- envolvam peritos que tenham atingido as categorias mais elevadas da sua carreira;
- embora temáticas, não sejam estanques entre si de forma a que a avaliação possa corresponder ao carácter interdisciplinar que os projectos de investigação têm cada vez mais;
- mantenham contacto directo com os avaliados quer visitando os laboratórios das unidades quer através de pedidos de esclarecimentos;
- definam os critérios de avalia-

ção de forma coordenada e deles dêem conhecimento à comunidade científica.

Aos avaliadores não deve ser solicitada a tarefa de propôr os quantitativos do financiamento. A eles deve apenas competir classificar os grupos e os centros tendo em conta os critérios definidos e emitir pareceres sobre a aquisição de equipamento.

À entidade financiadora deve caber a decisão quanto às verbas a atribuir face aos relatórios dos avaliadores, às regras para o efeito previamente fixadas e aos meios financeiros de que dispõe.

Na sua actuação as comissões de avaliação deveriam:

- realizar uma avaliação profunda de cada grupo e dos respectivos projectos, baseada nos objectivos do trabalho proposto, na coerência das propostas, nomeadamente com a constituição dos grupos e no trabalho realizado anteriormente e no seu impacte em termos de publicações.
- classificar as propostas dos grupos de forma a definir o valor da unidade de crédito base para atribuição das verbas citadas no ponto 2 anterior;
- emitir parecer sobre o interesse dos novos equipamentos que a unidade se propõe adquirir bem como sobre o merecimento que o grupo ou o Centro possa ter para os receber;
- emitir parecer sobre a oportunidade e necessidade de dotar o Centro ou os grupos de verbas para os novos bolsiros de pós-graduação.

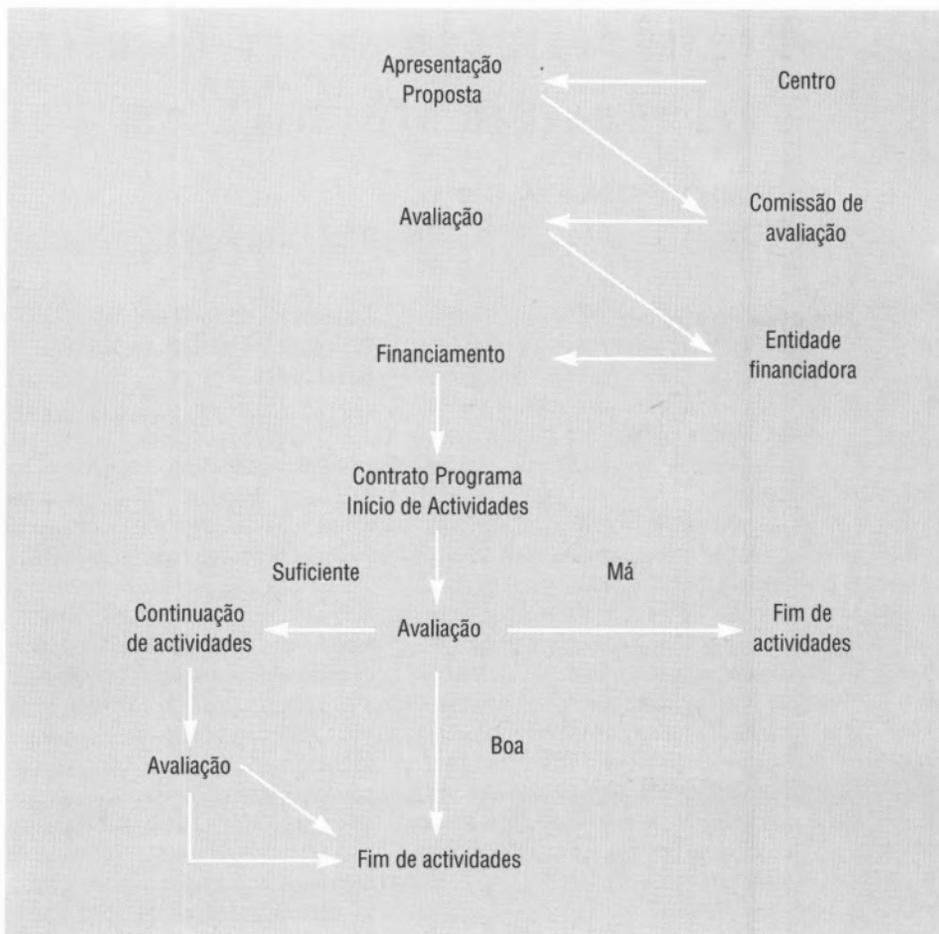
Uma vez aprovado e posto em execução o contrato programa entre a entidade financiadora e o Centro, caberá às comissões avaliadoras fazer o acompanhamento do mesmo, em particular após o ano x/2 da sua vigência. No final do primeiro ano apenas deverá ser exigido um relatório de progresso sucinto e comprovativo do início das actividades. Seria pois sobre o relatório de actividades no final do ano x/2 que recairia uma avaliação científica profunda, com novos contactos directos entre avaliadores e avaliados. Se os resultados obtidos fossem testemunhos inequívocos de cum-

primento do contrato, os grupos só voltariam a ser avaliados no final do contrato programa. Pelo contrário o contrato seria revogado em casos flagrantes de incumprimento dos objectivos estabelecidos. As situações intermédias requeririam uma nova avaliação após mais um ano de actividades.

O esquema proposto para o financiamento e avaliação das estruturas de investigação, resumido no quadro junto, nada tem de inédito em termos europeus. No entanto, só parcialmente foi ensaiado em Portugal. Complexo e exigindo sobretudo nos primeiros anos um esforço grande quer aos avaliadores quer à entidade financiadora pode, quando em regime estacionário, dar maior estabilidade às estruturas de investigação e à comunidade científica.

* Texto baseado na comunicação apresentada ao Seminário sobre Avaliação e Acompanhamento de Projectos de I&D (U. do Minho, Braga, Junho de 1993).

** Centro de Química-Física Molecular Universidade Técnica de Lisboa Complexo I, IST.



LUMIStox



Análise da
Toxicidade
na
Água e Solos
em 30 minutos

Um Sistema



Equipamento de controlo de qualidade e investigação, lda.

RUA INFANTARIA, 16, 41-2º 1200 LISBOA
TELEFONES 69 24 14 - 69 24 31 FAX 65 62 62

Breve reflexão sobre os últimos 25 anos da Indústria Química em Portugal*

CLEMENTE PEDRO NUNES**

Para se preparar o futuro com profundidade estratégica, é necessário analisar o passado recente a fim de nele descobrir as principais linhas de força que estão na origem das grandes questões que irão determinar esse mesmo futuro.

No caso da indústria química, aqui entendida no seu sentido mais amplo, que inclui as indústrias de todos os tipos que utilizem de forma apreciável reacções ou processos de engenharia química, esta tem em Portugal uma importância significativa e sofreu no último quarto de século uma evolução rica de acontecimentos, parecendo, pois, ser a altura de sobre ela fazer uma reflexão que nos permita clarificar a nova etapa que agora se inicia no contexto do Mercado Único Europeu.

O QUE É A INDÚSTRIA

Uma vez que se pretende analisar a indústria química no seu sentido lato, clarifiquemos um pouco os conceitos e as realidades de que estamos a tratar.

Partindo da definição académica mais ampla que considera como indústrias químicas aquelas em que "a matéria é tratada para se efectuarem mudanças de estado, de conteúdo energético ou de composição química" nela se incluem não só as indústrias de sínteses e reacções químicas, mas também as indústrias agro-alimentares, as indústrias farmacêuticas e de cosméticos, a fileira florestal-celulose-papel, a indústria cimenteira e mesmo outras indústrias mais de "fronteira" com a própria siderurgia e as indústrias de processos ligadas à exploração mineira e à metalurgia de base.

Trata-se, pois, dum vastíssimo sector industrial, englobando unidades de grande dimensão articuladas com outras de pequena e média dimensão constituindo no seu conjunto uma extensa malha de grande impacto no âmbito da economia portuguesa.

A INDÚSTRIA QUÍMICA EM PORTUGAL EM MEADOS DA DÉCADA DE SESENTA

Reforçada pelos importantes investimentos efectuados desde os finais da década de 50, a indústria química apresentava-se como um dos motores do desenvolvimento económico do País.

Assim, nesse período, tinham-se feito em Portugal importantes investimentos nesta área que incluíram o início da produção de amoníaco petroquímico e de nitratos, o reforço da produção de ácido sulfúrico com as então recentes tecnologias de contacto, o arranque de polímeros petroquímicos de PVC baseado na produção de VCM carboquímico nacional, o alargamento da produção de derivados de sódio na Soda Póvoa e arranque e produção de cloro e soda electrolítica em Estarreja.

Noutras áreas o desenvolvimento era também intenso:

- na celulose arranca em 1961 a fábrica de Constância com pasta de bisulfito, e em 1964 a fábrica de Setúbal, com pasta de sulfato;

- na indústria cervejeira entra em laboração a nova unidade de Leça do Balio, junto ao Porto, de grande dimensão e características inovadoras para a época;

- na refinação de petróleo, após o aumento de capacidade de Cabo Ruivo em 1956, para 1,2 milhões de toneladas, é autorizada a construção da refinaria do Norte, em Matosinhos.

A indústria química passava, assim, dum certa "adolescência" que a caracterizava para um "amadurecimento". Embora a esmagadora maioria dos equipamentos industriais relevantes fossem projectados e importados do estrangeiro, a instalação e arranque das unidades eram acompanhados e muitas vezes dirigidos por engenheiros portugueses, começando a desenvolver-se, sobretudo na Companhia União Fabril, o gosto pelo projecto autónomo de instalações e equipamentos industriais, em especial na área da química inorgânica pesada.

PERÍODO DE 1966 A 1973: A ÉPOCA DOS GRANDES PROJECTOS

O período desenvolvimentista já anteriormente verificado, a par dum alargamento dos mercados interno e externo, com a consolidação do papel de Portugal na EFTA (Associação Europeia de Comércio Livre liderada pelo Reino Unido e países nórdicos), veio dar um grande impulso à indústria química dentro dum quadro orientador definido nessa época pelo Estado no âmbito dos Planos de Fomento.

Assim, em 1969, inicia a produção a refinaria de Matosinhos, com uma capacidade de destilação de 2 milhões de toneladas/ano, dotada ainda duma moderna unidade de óleos lubrificantes, e logo em 1970 a refinaria de Cabo Ruivo, junto a Lisboa, é ampliada também para 2 milhões de toneladas/ano de destilação, passando a refinaria a incluir dez unidades diferentes a jusante.

Todavia, face aos crescentes consumos de derivados de petróleo registados no mercado português e europeu, e ao facto do Canal do Suez estar encerrado desde 1967 na sequência da Guerra dos Seis Dias, o que passou a privilegiar a rota do Cabo da Boa Esperança em detrimento do Mediterrâneo, o Governo decide autorizar o aumento da refinaria de Matosinhos para 5 milhões t/ano e, através do Decreto-Lei 270/71, aprovar a instalação duma grande refinaria e dum complexo petroquímico de olefinas em Sines.

Em articulação com a decisão relativa ao pólo de Sines, e tendo certamente uma preocupação de equilíbrio regional, é aprovado ainda em Novembro de 1971 o estudo da instalação duma petroquímica de aromáticos em Estarreja ou Matosinhos, e cuja concretização seria levada a cabo através duma colaboração entre a SACOR e o Amoníaco Português. Para dar corpo a este projecto é autorizado novo aumento da refinaria de Matosinhos, desta vez para 7,5 milhões de t/ano de destilação e seis unidades a jusante.

OS QUATRO GRANDES PERÍODOS CONSIDERADOS NOS ÚLTIMOS VINTE E CINCO ANOS DA INDÚSTRIA QUÍMICA EM PORTUGAL

1966 a 1973	Os grandes projectos
1974 a 1978	O primeiro choque petrolífero, a recessão económica e as transformações empresariais
1979 a 1984	O relançamento frustrado
1985 a 1992	A crise e a adaptação às novas realidades

Por detrás desta estratégia global de desenvolvimento económico estava também o princípio tendencial duma possível auto-suficiência petrolífera nacional baseada na produção de Cabinda e do Norte de Angola, então sob administração portuguesa.

O ano de 1971 marcou, pois, o culminar das expectativas anteriores e a consolidação do plano para converter a indústria química pesada no motor, por excelência, do desenvolvimento industrial e económico de Portugal. Foi um momento de sonho de grandeza cuja análise profunda ainda não está feita, mas que está longe de ter sido um ponto avulso no tempo como alguns críticos mais radicais vieram mais tarde a afirmar sem um estudo suficientemente profundo das opções estratégicas então tomadas, bem como das condicionantes que a partir de 1973/74 toda a indústria química pesada portuguesa passou a sofrer de forma muito intensa e gravosa.

A par destes grandes projectos surgem outros importantes desenvolvimentos industriais:

— construção duma unidade de ácido nítrico em Estarreja com capacidade de 110 000 t/ano, cujo arranque se vem já a dar em 1974, articulada com a produção a jusante de nitrato de amónio e adubos;

— arranque em Alverca da segunda fábrica de ácido nítrico em 1968, a par com a ampliação das unidades aí instaladas de adubos azotados;

— nas celulosas arrancam as unidades da CELBI na Figueira da Foz em 1965 e a unidade da CELTEJO em Vila Velha do Ródão em 1971;

— em 1968 é inaugurada a nova fábrica de cervejas e refrigerantes de Vialonga, próximo de Lisboa;

— em 1969 inicia a laboração a primeira grande fábrica portuguesa de anti-bióticos, a CIPAN, junto ao Carregado;

— a indústria de concentrados de tomate tem nesta altura um grande desenvolvimento, passando a exportar quantidades apreciáveis para outros países europeus, nomeadamente da EFTA;

— em 1973 inicia-se o fabrico de cimentos da CISUL, em Loulé, no Algarve, e, em 1974, da CINORTE, em Souselas, próximo de Coimbra.

PERÍODO DE 1974/78: O PRIMEIRO CHOQUE PETROLÍFERO, A RECESSÃO ECONÓMICA E AS TRANSFORMAÇÕES EMPRESARIAIS

Em Outubro de 1973, na sequência da guerra de Yom Kippur, é declarado um embargo petrolífero aos países ocidentais, seguido da quadruplicação dos preços do petróleo dos países exportadores da OPEP.

Após alguma perplexidade inicial, o ano de 1974 confirma que a OPEP consegue impôr, como cartel produtor, o novo preço do petróleo, o que origina não só um profundo desequilíbrio das balanças de pagamento dos países europeus, como altera os pressupostos dos projectos efectuados no período anterior em Portugal, nomeadamente na química orgânica pesada, toda ela baseada no petróleo.

A análise fria e ponderada das consequências do que se estava a passar, em termos da revisão da anterior estratégia de desenvolvimento industrial em Portugal, foi todavia seriamente prejudicada pelas profundas transformações políticas que o País então atravessou, e que alteraram drasticamente o anterior quadro da gestão industrial através das nacionalizações então decididas. Note-se que a indústria química foi particularmente afectada por este processo:

— nacionalização da CUF, dos Nitratos de Portugal e do Amoníaco

Português, posteriormente fundidas em 1978 numa única empresa, a QUIMIGAL;

— nacionalização da SACOR, da SONAP e da PETROGAL, posteriormente fundidas numa única empresa, a PETROGAL;

— nacionalização da Companhia Portuguesa de Celulose, da SOCEL, da CELTEJO, da CELNORTE e das Celulosas do Guadiana, todas elas integradas de seguida numa nova empresa, a PORTUGALCEL;

— nacionalização da Empresa de Cimentos de Leiria, da Cimentos Tejo, da CISUL e da CINORTE, dos Cimentos do Cabo Mondego, posteriormente integradas numa única empresa, a CIMPOR;

— nacionalização da Siderurgia Nacional;

— nacionalização das três grandes empresas cervejeiras portuguesas.

Note-se que além das empresas foram "nacionalizados" os dois "projectos" mais emblemáticos do período anterior: a Companhia Nacional de Petroquímica, com o seu grande projecto dum "steam-cracker" de olefinas e polímeros a jusante, e o projecto de petroquímica de aromáticos integrado em parte na nova PETROGAL e em parte no Amoníaco Português, posteriormente integrado na QUIMIGAL.

— *E, perguntar-se-á, que se decidiu fazer no âmbito das realidades concretas da gestão industrial, para adaptar as empresas à nova realidade internacional?*

A construção da refinaria da PETROSUL, em Sines, já em curso em 1973/74 prosseguiu sensivelmente de acordo com os planos iniciais, apenas afectados pelos atrasos inerentes aos conflitos sociais então verificados, vindo a arrancar em 1978.

O projecto da petroquímica de aromáticos iniciou a sua concretização com a produção de mononitrobenzeno e anilina em Estarreja, já então no âmbito da QUIMIGAL. O seu abastecimento veio a ficar dependente, numa primeira fase, da importação de benzeno através do terminal de Aveiro.

Este início de consumo de aromáticos em Portugal veio dar um impulso estratégico decisivo que ultrapassou as hesitações eventualmente existentes e fez avançar com a construção da unidade de BTX junto à refinaria de Matosinhos.

Quanto ao caso do projecto da petroquímica de olefinas, baseada num "steam-cracker" com capacidade de pro-

dução de 200 000 t/ano de etileno, a evolução é mais interessante. A revisão dos parâmetros a que se procedeu em 1974 e 1975 levou a que fosse definido em 1976 (por decisão governamental!) o aumento da capacidade do "steam-cracker" de 200 000 para 300 000 t/ano e a construção de mais 18 unidades a jusante do que as 6 inicialmente previstas, bem como todas as infra-estruturas de apoio, incluindo uma central térmica de 70 MW. Procurava-se ganhar no efeito de escala o equilíbrio perdido, ignorando-se as realidades do mercado consumidor a jusante.

Todavia a construção do complexo nestes novos parâmetros foi iniciado e em 1978 encontrava-se já num ponto dificilmente reversível. A atestar esta tendência e confirmando de certa maneira a capacidade do Estado de levar à prática, embora com considerável atraso, os grandes projectos que o sector privado tinha em mãos antes da crise de 1973/74, arrancava em Sines em 1978/79 a grande refinaria da PETROGAL, com capacidade para processar dez milhões de t/ano de petróleo bruto, passando assim o País a ser largamente excedentário em termos da capacidade de refinação.

PERÍODO DE 1979/84. O RELANÇAMENTO FRUSTADO

O início de 1979 marcou assim um ponto de viragem nos grandes investimentos previstos na indústria química pesada; após um período de atrasos e algumas indefinições que se arrastaram por cerca de quatro anos, o desenvolvimento industrial por que o País ansiava, para poder melhorar os seus padrões económicos e propiciar empregos melhor remunerados, voltava a basear-se na revitalização e conclusão dos projectos anteriores a 1973/74.

Para esta redinamização contribuíram também o relativo sucesso da aplicação do primeiro programa de estabilização do FMI e uma certa retoma económica a nível internacional.

Neste quadro arranca em 1981 a petroquímica de aromáticos da PETROGAL em Matosinhos, cujo benzeno passa a alimentar as unidades de mononitrobenzeno/anilina da QUIMIGAL em Estarreja, e em 1982 inicia a laboração o "steam-cracker" da Companhia Nacional de Petroquímica em Sines que, todavia, só viria a estabilizar a sua produção a partir de 1984, devido a problemas técnicos

e comerciais que se foram arrastando. Tal não impediu o arranque em 1982, das unidades de polietileno de alta densidade, polietileno de baixa densidade e de polipropileno, todas da EPSI.

Para além da concretização destes projectos já antigos, é neste período, e sobretudo entre 1979 e 1981, que se dá a ilusão da possibilidade dum relançamento da indústria química nos mesmos moldes de gestão estratégica que haviam caracterizado o final dos anos sessenta.

Registemos alguns factos que confirmam esta apreciação:

- prosseguimento pela QUIMIGAL da construção da unidade de peletização de cinzas de pirite (conhecida como unidade Kowa Seiko), instalada no Barreiro, que viria a arrancar em 1981/82 para encerrar poucos meses depois por falta de viabilidade económica;

- construção de unidades de polióis, resinas de poliéster, poliuretanos, plastificantes e fibra de vidro também pela QUIMIGAL no Barreiro, com início de produção também em 1981;

- aprovação da construção em 1982 da unidade de ftalatos pela então Petroquímica e Gás de Portugal em Cabo Ruivo, aumentando assim a integração a jusante dos aromáticos pelo consumo de ortoxileno;

- dado que a subida das cotações internacionais da nafta química tornara inviável a produção de amoníaco a partir desta matéria-prima, é aprovada em 1980 a instalação duma grande fábrica de amoníaco pela QUIMIGAL no Lavradio, a partir de resíduos de vácuo, com capacidade para 220 000 t/ano, o que iria permitir o encerramento de todas as unidades então existentes;

- para aumentar o valor acrescentado em Portugal a jusante dos aromáticos/anilina, estabeleceu-se uma "joint-venture" entre a QUIMIGAL e a UPJOHN para a produção de 50 000 t/ano de isocianatos em Estarreja; esta unidade iniciou laboração em 1982.

Todos estes investimentos, de que o Estado foi o agente único ou dominante, padeceram, em retrospectiva, de dois graves erros de avaliação estratégica:

- a) não foi salvaguardada a capacidade nacional de endogenizar as tecnologias utilizadas nem foi feito um esforço para gerir a capacidade de inovação tecnológica duma forma mais agressiva que anteriormente, tendo em vista o aumento da competitividade dos produtos finais em mercado aberto;

- b) o mercado a jusante continuou

a ser sobrevalorizado não tendo sido feito um esforço suficientemente rigoroso para adaptar as produções previstas à capacidade dos mercados nacional e internacional de as vir a absorver a preços compatíveis e em tempo útil.

É justo sublinhar que a "sorte dos deuses" em nada favoreceu este esforço de relançamento do investimento, e o segundo grande choque petrolífero de 1980/81, provocado pela queda do Xá do Irão e pela subida ao poder nesse país do fundamentalismo xiita, constituiu para toda a economia portuguesa um golpe profundo e devastador que a fez entrar em recessão profunda a partir de 1982/83.

Registe-se, todavia, que no período em análise também o sector privado ou, melhor dizendo, não-estatal, efectuou investimentos de algum vulto de que podemos salientar:

- entrada em funcionamento em 1984, perto da Figueira da Foz, da fábrica de celulose da SOPORCEL;

- a CIRES, produtora de resinas de PVC, aumenta em 1982 a sua capacidade global com 8 500 t/ano de PVC-emulsão;

- também em 1982 a UNITECA moderniza as células electrolíticas e aumenta a capacidade para 20 000 toneladas/ano de soda cáustica.

PERÍODO DE 1985/92: A CRISE E A ADAPTAÇÃO ÀS NOVAS REALIDADES

Os anos de 1984 e 1985 constituíram um período de dolorosa correcção dos desequilíbrios que se haviam gerado nas finanças públicas, tendo havido mais uma vez que se recorrer às "terapias de choque" do FMI.

Embora algumas grandes indústrias químicas como a CIMPOR, a PORTUCEL e a CIRES continuassem a registar situações financeiras desafogadas, outras, nomeadamente a QUIMIGAL, a Siderurgia Nacional, a Companhia Nacional de Petroquímica e mesmo a PETROGAL, enfrentavam dificuldades financeiras crescentes, com prejuízos acumulados e total incapacidade de fazer face às amortizações dos investimentos efectuados no período antecedente.

O Estado, como accionista, estava sem recursos financeiros para injectar as verbas necessárias, e a abertura comercial que uma adesão às Comunidades Europeias iria provocar punha em sérias dúvidas a própria viabilidade económica futura de empresas habituadas a movi-

mentarem-se sobretudo num mercado restrito e protegido.

— *De facto, foi uma ironia da nossa história industrial que um dos períodos em que o Estado português mais fortemente interveio directamente na actividade industrial (1975/1985), fosse seguido dum período (após 1986) de crescente desintervenção do Estado e de abertura das nossas fronteiras à Europa, como anteriormente nunca se havia verificado. Como choque entre diferentes perspectivas de enquadramento estratégico dificilmente se poderia ter tido um solavanco mais violento!*

De entre as empresas em maior risco de soçobrar, três grandes empresas de processos químicos foram objecto de especial atenção do Estado:

- a QUIMIGAL;
- a Companhia Nacional de Petroquímica/EPIS;
- a Siderurgia Nacional.

Enquanto a QUIMIGAL e a Siderurgia Nacional foram objecto de planos especiais de reconversão, a CNP/EPIS foi objecto dum processo de privatização por concurso que levou posteriormente ao seu controlo pela multinacional finlandesa Neste Oy.

Em qualquer dos casos o objectivo apresentava-se claro: tentar reconverter e tornar viáveis todas as unidades com um mínimo de capacidade concorrencial a nível dum mercado europeu aberto, eliminar todos os custos não essenciais e encerrar todas as unidades obsoletas.

Registe-se que, apesar dos graves problemas surgidos, a malha da indústria química nacional se tinha fortalecido bastante em termos produtivos e que o desafio era basicamente de optimização da gestão do parque industrial existente.

Simultaneamente as celulosas beneficiaram até 1990 duma conjuntura internacional muito favorável, tendo-se reconvertido em 1986 a unidade da PORTUCEL em Mourão, prosseguindo por outro lado a CIMPOR com resultados desafogados.

Noutras áreas da indústria química é de referir:

— o arranque duma segunda grande unidade de produtos farmacêuticos de base, a HOVIONE;

— a reconversão tecnológica da produção de mononitrobenzeno/anilina com o arranque duma nova unidade de nitrção adiabática, que veio tornar concorrencial a ANILINA DE PORTUGAL como nova empresa do Grupo QUIMIGAL;

— os aumentos de capacidade

registados na CIRES e na UNITECA;

— o início da produção de novos compostos de sódio por parte da SODA PÓVOA.

Até final de 1992 o sector da indústria química estatal havia sido reduzido pela privatização parcial (25%) do capital social da PETROGAL, pela privatização de várias empresas provenientes da completa reestruturação efectuada a partir de 1989 no Grupo QUIMIGAL (NUTASA, CUF Têxteis, LUSOL, PLASQUISA, LUSOFANE, SONADEL, TINCO e PREVINIL) e pela já referida privatização da CNP/EPIS.

O FUTURO: OS DESAFIOS DO MERCADO ÚNICO EUROPEU

A primeira pergunta que pode ressaltar a um observador atento desta breve viagem dum quarto de século à evolução da indústria química em Portugal, é a seguinte:

— *Se há 25 anos a indústria química estava a acabar a "adolescência", será que entrou entretanto numa "velhice precoce"?*

Em mercado aberto a indústria química, como qualquer realidade empresarial, depende das oportunidades, dos factores competitivos e da inteligência que os seus dirigentes tiverem para enfrentar os novos desafios.

Situada na encruzilhada de tecnologias em permanente evolução, dotada dum vasto património produtivo, a indústria química em Portugal enfrenta todavia concorrentes poderosos, alguns dos quais situados no Próximo Oriente se têm vindo a desenvolver de forma acelerada nos últimos anos. Assim, o seu futuro depende, em primeiro lugar e como em nenhum outro sector, dum novo conceito de Gestão Industrial, que saiba integrar as potencialidades dos recursos humanos com preparação científica de alto nível nas realidades empresariais existentes.

A urgência desta interacção, deste diálogo criativo, faz-se sentir de forma aguda desde pelo menos 1980, quando se deu o relançamento atrás referido e que veio a ficar frustrado. O futuro profissional dos jovens licenciados, mestres e doutores em Engenharia Química e em Química depende da evolução que tiver a Indústria Química mas, por outro lado, se eles não puderem ser mobilizados e não aceitarem o desafio que a Indústria Química lhes coloca, o futuro desta será

na melhor das hipóteses, medíocre.

— *E como articular o perfil do gestor com o perfil do tecnólogo e do cientista?*

Continuo a pensar, tal como quando me doutorei já há 17 anos, que nada de mais reconfortante para um investigador em engenharia do que poder ajudar a transformar os seus estudos em realidades concretas, em ferramentas de competitividade e optimização permanente de realidades industriais.

Um gestor industrial terá que saber transmitir esse espírito aos seus melhores técnicos sob pena de não estar a assegurar o futuro da sua empresa. O cientista e o tecnólogo que querem trabalhar numa empresa têm que compreender que o seu trabalho é definido em função da estratégia empresarial global para o qual ele dará *um contributo que a maior parte das vezes é importante mas muitas vezes não é decisivo.*

Se isto for bem compreendido em muitas indústrias químicas portuguesas, a *inovação tecnológica competitiva* terá nelas um lugar muito mais preponderante do que hoje tem, e as "batalhas industriais" aqui relatadas poderão ter no futuro mercado europeu, em que já entrámos, uma evolução globalmente mais positiva do que aquela que se verificou no último quarto do século.

REFERÊNCIAS

1. R. Guedes de Carvalho, "Alguns casos típicos da evolução da Engenharia Química em Portugal", *Ingenium*, **2** (1986) 57.
2. C. Pedro Nunes, "A universidade e a indústria em Portugal: pistas para uma cooperação efectiva", *Técnica*, **42** (1981) 462.
3. C. Pedro Nunes, "Investigação e Desenvolvimento no contexto da indústria química portuguesa: uma experiência", Seminário sobre "O papel do Engenheiro Químico na Indústria", IST (1985).
4. C. Pedro Nunes, "A inovação tecnológica na indústria química em Portugal: algumas reflexões", *Ingenium*, **36** (1990) 68.

* Texto baseado na conferência proferida em Novembro de 1992 no Instituto Superior Técnico, integrada nas Jornadas de Inovação Tecnológica na Indústria Química

** Administrador da QUIMIGAL, S.A.; Professor do I.S.T.; Coordenador do Colégio de Engenharia Química da Ordem dos Engenheiros/Região Sul

A Química da Cortiça: ponto da situação

LUÍS MANUEL C. C. GIL*

É abordada a química da cortiça, nomeadamente a sua constituição, a partir da estrutura do tecido celular, fazendo-se uma descrição abreviada do estado dos conhecimentos respeitante a cada um dos grupos de constituintes e referindo-se a incidência industrial da cortiça como matéria-prima na obtenção de produtos químicos.

São também apresentadas as lacunas de conhecimento e as vias de estudo sobre este tema, acerca do qual os estudiosos não se têm debruçado tanto quanto seria de desejar, nomeadamente em Portugal, em que a cortiça possui uma importância determinante.

INTRODUÇÃO

O estudo da constituição química da cortiça foi iniciado no século XVIII, aparecendo referências bibliográficas cadenciadas ao longo do tempo, até ao início da 2ª Guerra Mundial, altura em que, dada a escassez de algumas matérias-primas, houve necessidade de implementar o estudo de produtos alternativos, entre os quais a cortiça.

Surgiu então um maior fluxo de informação relacionada com este material, sobretudo da autoria de investigadores americanos, franceses e espanhóis,

aparecendo a partir da década de 50 também alguns trabalhos de investigadores portugueses, com maior frequência nos anos 80.

Dado o interesse estratégico da cortiça no contexto nacional — e também a nível internacional, sendo de salientar que a NASA inclui este material numa lista de matérias-primas com interesse para aplicação em aeronáutica espacial e militar [1] — e verificando-se que o estudo da sua composição e aplicação de produtos químicos derivados não têm ocupado muito os químicos do nosso país, havendo ainda muito por estudar neste domínio, será importante averiguar o que actualmente se sabe, avaliando-se os temas controversos e os que ainda estão por explorar.

CORTIÇA COMO MATERIAL

A cortiça é um material com aplicações conhecidas desde a Antiguidade, sobretudo como artefacto flutuante e como vedante, cujo mercado teve uma enorme expansão a partir do início deste século, face ao desenvolvimento dos diversos tipos de aglomerados.

Por definição [2], a cortiça é o parênquima suberoso originado pelo meristema súbero-felodérmico do

sobreiro (*Quercus suber*, L.), constituindo o revestimento do seu tronco e ramos.

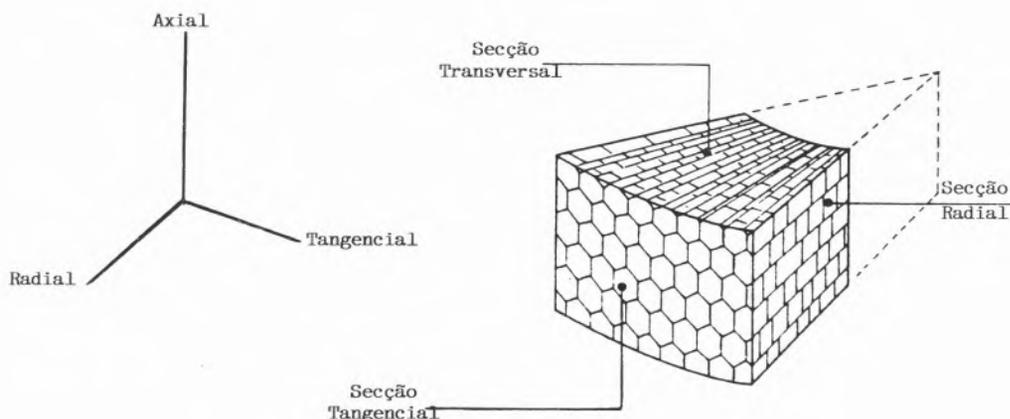
Macroscopicamente, é um material leve, elástico e praticamente impermeável a líquidos e gases, imputrescível, devido à pobreza em elementos albuminóides e à presença de taninos [3].

Trata-se de um tecido vegetal, constituído por células mortas, em camadas sucessivas (com valores médios entre 40 e 100 milhões por cm^3), cujas membranas sofrem suberificação — deposição em camadas de compostos que lhe conferem impermeabilização — e que contêm no seu interior uma mistura gasosa rica em azoto [4].

As células produzidas no Outono são em menor número, mais curtas e de paredes celulares mais espessas do que as chamadas células de Primavera, cuja diferenciação constitui as camadas anuais (anéis), que correspondem à cortiça produzida durante um ciclo vegetativo anual.

As células de cortiça típicas têm o formato de um prisma hexagonal, estando empilhadas lateralmente de modo que cada célula está em contacto com 14 células vizinhas, e com uma disposição segundo as diferentes direcções, de acordo com o que se pode observar na Figura 1.

Figura 1. Disposição das células de cortiça



Estas células apresentam uma dimensão média de 20-25 μm e a espessura das paredes celulares é de 1,5 μm .

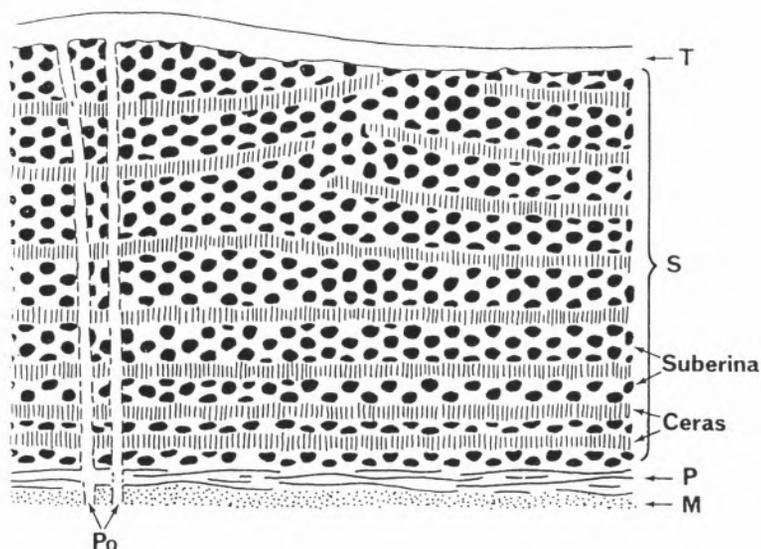
As paredes celulares são constituídas por três camadas — uma lamela média e uma parede primária fina lenhificada, uma parede secundária formada por camadas alternadas de suberina e ceras, e uma parede terciária de lenhina e celulose [5], como se pode ver na Figura 2. São as paredes primária e terciária que conferem a estrutura de suporte às células.

COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA CORTIÇA

A cortiça engloba na sua composição vários tipos de compostos, que tradicionalmente são divididos em cinco grupos, apresentando os seguintes valores típicos [6]: Suberina (45%); lenhina (27%); polissacáridos (12%); ceróides (6%); e taninos (6%).

Estes grupos são assim considerados face ao conjunto de compostos que incluem e ao seu modo de obtenção/separação. Os valores médios indicados podem ter variâncias elevadas, dado a cortiça ser um material natural, cuja constituição é influenciada por diversos factores — tipo de solo, clima, condições vegetativas, idade da árvore, tipo de exploração florestal — e ainda

Figura 2. Estrutura da parede celular da cortiça



M - Lamela média
P - Parede primária
S - Parede secundária
T - Parede terciária
Po - Poros

por poderem ser relativos a diferentes tipos de cortiça e métodos de análise.

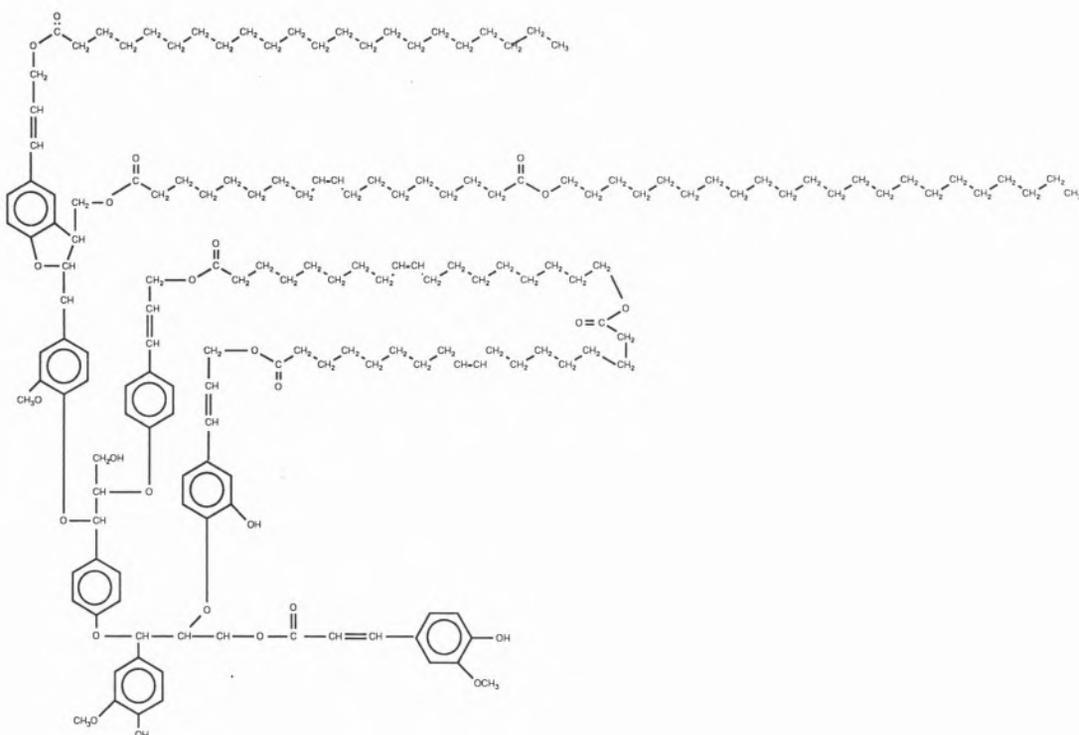
A *suberina* é o componente maioritário da cortiça e tem sido um dos mais estudados. Existe nas paredes celulares, em camadas alternadas com substâncias ceróides.

É um polímero misto de monóme-

ros aromáticos e alifáticos (poliéster), com uma estrutura complexa, e constituído por ácidos gordos de cadeia longa (18 a 30 átomos de carbono), cujas funções carboxílicas se encontram esterificadas por compostos fenólicos (ligações éster entrecruzadas) [7].

Um modelo proposto [8] é o apre-

Figura 3. Proposta de modelo para a estrutura da suberina [5]



sentado na Figura 3.

Por despolimerização da suberina, obtêm-se hidroxiácidos alifáticos, ácidos gordos (mono e dicarboxílicos), alguns alcanóis e resíduos fenólicos. Verificou-se que os monômeros da suberina são maioritariamente constituídos pelos hidroxiácidos com 16 a 26 átomos, seguindo-se os ácidos dicarboxílicos e todos os outros (alcóis alifáticos e ácidos monocarboxílicos) [9], sendo os mais importantes, quantitativamente, os ácidos 22-hidroxiocosanóico, 9,10-dihidroxiocotadecanodióico, 9,10,18-trihidroxiocotadecanóico e docosanodióico. Quanto aos resíduos fenólicos, é escassa a informação.

Estes compostos, por serem multifuncionais, apresentam interesse em reacções de polimerização inter e intramoleculares, quer para o conjunto de componentes [10], quer para alguns componentes em particular [11].

Verificou-se ainda que há diferenças no teor de suberina em diferentes qualidades de cortiça, com uma diminuição deste teor para a cortiça de inferior qualidade [5].

A lenhina é também um polímero de estrutura entrecruzada, parcialmente aromática, constituído por alcoóis derivados do 1-fenilpropano [12]. Na cortiça, a lenhina é habitualmente obtida como resíduo, após extracção dos ceróides e taninos com solventes, despolimerização da suberina e hidrólise dos polissacáridos.

A macromolécula da lenhina, tem elevado peso molecular, sendo o componente que confere rigidez à parede celular. O modelo da matriz polimérica da lenhina da cortiça é o mesmo da madeira.

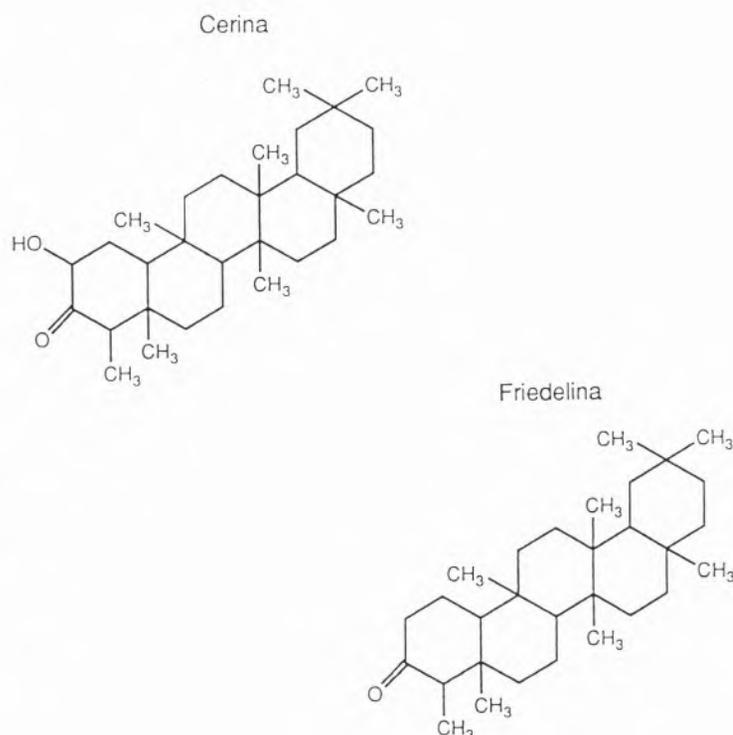
Dado que se trata de um polímero com uma estrutura amorfa, irregular e reticulada, ao contrário dos polissacáridos, existem valiosas aplicações possíveis para os seus fragmentos menores [13].

Os polissacáridos da cortiça, são constituídos por dois tipos de polímeros; a celulose (homopolímero) e as hemiceluloses (heteropolímeros).

Estes compostos são também polímeros de elevado peso molecular, sendo a celulose constituída por monómeros de β -D-glucopiranosose, interligados por ligações glicosídicas [12].

As hemiceluloses (hexoses e pentoses), estão associadas à celulose e à lenhina na parede das células [12], sendo facilmente hidrolisadas por ácidos, originando-se os seus constituintes monoméricos. São também solúveis em água e

Figura 4. Fórmulas de estrutura dos principais triterpenóides da cortiça



em soluções fracamente alcalinas.

Os polissacáridos, em associação com a lenhina, são os responsáveis pela estrutura de suporte das paredes das células de cortiça.

A *fracção ceróide* da cortiça é constituída por alcanos (de 16 a 34 átomos de carbono), alcanóis (29 a 36 átomos de carbono) e triterpenóides (maioritários) [5,7].

Estes produtos são usualmente obtidos directamente da cortiça, por extracção com solventes orgânicos e posteriores operações de separação e purificação, o que demonstra que se encontram numa forma não combinada nas paredes das células [6,14], parecendo contribuir, conjuntamente com a suberina, para uma certa impermeabilização das mesmas.

Entre os triterpenóides, dado o seu quantitativo, são de destacar a friedelan-3-ona que corresponde a cerca de 2% em peso da cortiça e a 2-hidroxi-friedel-3-ona [6,7], cuja estrutura é apresentada na Figura 4.

Foram também isolados outros

derivados de esqueleto triterpénico [7,15]; estes compostos apresentam pesos moleculares entre 400 e 600 g/mole, com pontos de fusão entre 250°C e 320°C [16,17].

Verificou-se haver um maior teor de ceróides na cortiça virgem, quando comparada com a cortiça de reprodução. Há conhecimento de tentativas de aplicação dos ceróides em bruto, como ceras de utilização comum [10] e de alguns dos seus componentes em utilização de alto valor acrescentado [18].

Na chamada *fracção taninosa*, os taninos, obtidos da cortiça por extracção com água, são os componentes existentes em maior percentagem [19].

Estes, são compostos fenólicos que aparecem numa forma polimerizada, com pesos moleculares habitualmente compreendidos entre 500 e 3000 g/mole, sendo usualmente divididos em dois grupos [7,20]: taninos hidrolisáveis e taninos condensados.

Os primeiros, também designados pirogálicos, são constituídos por ésteres do ácido 3,4,5-trihidroxibenzoico e

da glucose e por outros compostos similares que, por hidrólise com água, dão origem a estes produtos.

Os taninos condensados (ou catéquicos), são formados por policondensação de monómeros do tipo flavonóide, constituindo polímeros de catequinas (flavanóis) e leucoantocianidinas (flavanodióis).

Nesta fracção de componentes químicos há que referir ainda as substâncias fenólicas simples, como por exemplo o *o*-dihidroxibenzeno [20].

Os taninos possuem numerosas aplicações do ponto de vista industrial [21,22] e mesmo em medicina [23].

Foram também isolados da cortiça alguns *esteróides*, obtidos dos resíduos de material suberoso, após extracção com solventes e saponificação [24], tendo sido referenciado, por exemplo, o 24R-estigmaest-5-en-3 β -ol.

A *composição mineral* da cortiça, é reflectida globalmente no seu teor de cinzas, com valor entre 1% e 3% em peso [25].

Através da análise de elementos existentes, verificou-se ser o cálcio o elemento mais abundante, existindo ainda uma quantidade proporcionalmente importante, constituída por potássio, fósforo e magnésio [5,26].

Os teores de elementos minerais da cortiça, sobretudo o cálcio e o magnésio, são baixos quando comparados com outros referentes à casca de árvores da mesma família, o que poderá estar relacionado com a baixa fertilidade dos solos onde o sobreiro floresce [27].

Um trabalho de revisão mais completo sobre a composição química da cortiça, reflectindo uma pesquisa bibliográfica exaustiva sobre este tema foi já efectuado [28], havendo conhecimento de três trabalhos posteriores [29-31].

PROCESSOS DE OBTENÇÃO E APLICAÇÕES DOS COMPONENTES QUÍMICOS DA CORTIÇA

Em 1949, iniciou-se a produção industrial em França, de produtos químicos a partir da cortiça, baseada nas patentes de dois professores franceses, para obtenção de uma mistura de ácidos gordos, por saponificação directa de granulado de cortiça, com uma solução alcalina [32]. Tem-se conhecimento de terem sido montadas a fábrica FRANSUBER e posteriormente a QUICOR, respectivamente em França e Portugal, tendo no caso português a fábrica sido

encerrada ao fim de poucos anos (extraía ceras e ácidos gordos da cortiça para fins diversos).

Estes processos [32,33] permitiam a obtenção da mistura de ácidos gordos da cortiça, mas como havia interesse na obtenção de diversos monómeros isolados, foram desenvolvidos processos baseados na diferente solubilidade dos sais compostos. Um destes processos foi também objecto de patente no nosso país [34] e há conhecimento de um outro patenteado nos Estados Unidos [35].

As primeiras referências sobre as aplicações dos monómeros da suberina, individualmente ou em grupo, relacionam-se com a obtenção de materiais poliméricos e com a utilização de um dos monómeros na síntese de produtos para perfumaria [10,11]. Esta síntese, dá origem a uma cetona cíclica, com aroma a almíscar [14]. São descritas aplicações de misturas de ácidos gordos em emulsão na estabilização da borracha [3,10] e para conferir propriedades de aderência a vernizes [32,36].

A utilização da polimerização dos monómeros da suberina, após pré-despolimerização, como auxiliar de aglomeração de partículas de cortiça, foi um processo também já patenteado [29,37] em Portugal.

No caso da lenhina, pode-se, por exemplo, obter a vanilina (fragância e sabor) a partir dos seus fragmentos [13]. São também conhecidos métodos para a produção de polímeros de diferentes tipos, a partir da lenhina e dos seus produtos de degradação de baixo peso molecular [38]. Há também outras utilizações possíveis: como fonte de energia e no fabrico de colas do tipo fenol-formaldeído [38].

Nos finais da década de 40 surgiram também as aplicações industriais para os ceróides da cortiça, uma vez que, dado o seu elevado ponto de fusão, estas ceras permitem substituir com vantagem as ceras de utilização comum, com fins variados, como sejam o revestimento de frutas, aplicações em tintas e vernizes, ceras e graxas industriais e outras [39], sobretudo para aplicações alta temperatura.

Do ponto de vista industrial, refira-se, no entanto, a obtenção mais fácil e vantajosa dos ceróides da cortiça, a partir de um resíduo da indústria corticeira, os condensados do vapor de cozimento do aglomerado negro, que constituem só por si um extracto em bruto da cortiça. É assim possível obter, por exemplo,

a friedelan-3-ona, através de operações fáceis de extracção, separação e purificação, cuja aplicação em formulações para cura de certos tipos de cancro, inflamações, úlceras e desintérias foi já estudada [18]; conhecem-se também as suas propriedades anti-fágicas para certos insectos [18,30].

Entre as utilizações industriais dos taninos referem-se a curtição de peles, a protecção de redes de pesca, aplicação em tintas e inibidores de fungos [21,22]. São referidas ainda aplicações em medicamentos para doenças do coração [23]. Além deste tipo de utilizações, os taninos condensados, podem ser usados como matéria-prima na síntese de resinas do tipo fenol-formaldeído [40].

CONCLUSÕES

Como se pode depreender dos trabalhos publicados sobre a química da cortiça, a evolução dos conhecimentos foi acompanhando os avanços da química laboratorial. As novas técnicas analíticas que foram surgindo permitiram novas aproximações e o esclarecimento de algumas questões ainda pendentes.

Apesar de tudo isto, pode-se afirmar que há ainda muito por estudar neste campo, quer no que diz respeito à identificação de novos compostos, principalmente dos grupos de componentes menos estudados, nomeadamente os taninos e a lenhina, quer partindo posteriormente para estudos de aplicação destes, nos mais variados domínios.

Mais especificamente, no caso de suberina parece evidente que foram esquecidos os compostos aromáticos, cuja quantificação e identificação poderiam contribuir para o esclarecimento da controvérsia ainda existente, relativamente à sua estrutura. Para além de estudos com interesse sobre novos tipos de polímeros, baseados nos monómeros da suberina, seria ainda importante aprofundar os estudos da sua ciclização e aplicações.

Por outro lado, poderia ainda ser estudada a reactividade e actividade (nomeadamente biológica) dos compostos obtidos da cortiça ou dos seus derivados, no seguimento de alguns dos estudos já efectuados.

Estes estudos para novas aplicações, deveriam ter como objectivo prioritário a obtenção de produtos de alto valor acrescentado, e de um modo integrado que permita a utilização de todas as fracções constituintes, valorizando o papel da

cortiça como matéria-prima de base.

Finalmente, e dado a cortiça ser um produto natural, cuja composição varia devido a inúmeros factores, seria muito interessante relacionar a sua composição química, através da quantificação individual ou relativa de grupos de componentes, com o comportamento e características macroscópicas da cortiça, permitindo quantificar a "qualidade" do material, o que até aqui tem sido realizado de modo muito subjectivo.

REFERÊNCIAS

1. J. Cobra, "As questões da qualidade face ao desenvolvimento de estratégias empresariais", Intervenção no *Seminário Internacional de Cortiça*, Porto, Novembro 1991.
2. Norma Portuguesa NP-273-Cortiça. Terminologia-CT-16, IPQ, Lisboa, 1970.
3. M.J. Gonçalves, "Química da cortiça - Contribuição para o seu conhecimento". *Boletim do IPF-Cortiça*, **191** (1954) 303; **193** (1954) 7.
4. J.V. Natividade, *Subericultura*, Porto, Ministério da Economia - Direcção Florestais e Agrícolas, 1950.
5. M.M. Caldas; J.M.L. Ferreira; M.A. Borges, "Abordagem sobre a caracterização química da cortiça nas várias etapas do processamento industrial", *Boletim do IPF - Cortiça*, **560** (1985), 549.
6. A. Guillemonat, "Progrés récent des l'étude de la constitution chimique du liège". *Bull. Fac. Sci. Marseille*, (1960), 45.
7. H. Pereira, "Constituição química da cortiça — Estado actual dos conhecimentos", *Boletim IPF - Cortiça*, **483**, (1979), 259.
8. P.E. Kollattukudy, "Lipid polymers and associated phenols", in F.A. Loewus, and V.C. Runeckles, *The Structure, Biosynthesis and Degradation of Wood*, Plenum, 1977, 7-227.
9. P.J. Holloway, "Composition of suberin from the corks of *Quercus suber* and *Betula pendula roth*". *Chem. Phys. Lipids*, **9** (2) (1972), 158.
10. J. D'A. Martinie, "Uma nova utilização da cortiça", *Boletim JNC*, **140** (1950) 241.
11. J.F. Yanes, S.G.B. Ozores, "Polímeros obtidos a partir de los ácidos del corcho". *Rev. Plásticos Modernos*, **159** (1969) 691.
12. J.F. Sian, *Transport Process in Wood*, Springer Verlag, Berlim (1984) 63-70.
13. J.S. Carvalho, J. S., "Algumas reflexões sobre a investigação química da cortiça", *Boletim JNC*, **287-288** (1962) 219-247.
14. I. Ribas-Marques, "Étude sur la constitution chimique du liège". *Chimie & Industrie*, **68** (1952) 333.
15. I. Ribas-Marques, J. Fernandez-Salgado, "Química del corcho-XXIII. Investigaciones sobre los triterpenoides". *Boletim IPF - Cortiça*, **436** (1975) 35.
16. N.L. Drake, R.P. Jacobsen, "Cerin and Friedelin. I. Their Molecular Weights and Empirical Formulas". *J. Am. Chem. Soc.*, **57** (1935) 1570.
17. Y. Chrétien-Béssièrre, L. Duhamel, - Sur la présence de bétuline dans la liège". *Mem. Soc. Chimique, Franç.* (1962) 228.
18. R.F. Chandler, S.N. Hooper, "Friedelin and associated triterpenoids". *Phytochemistry*, **18** (1979) 711.
19. H. Pereira, "Doseamento dos taninos da cortiça de *Quercus suber* L.", *Boletim IPF-Cortiça*, **550** (1984) 244.
20. J. Soares, Taninos na cortiça. Laboratório de Estudo e Ensaio da Cortiça, Separata, Instituto dos Produtos Florestais, Lisboa, 1974.
21. J. Doat, "Les tanins dans les bois tropicaux". *Bois et Forêts des Tropiques*, **182** (1978) 37.
22. F. O'Flaherty, *Chemistry and Technology of Leather*. Vol. 4, Reinhold, 1965, 98-160.
23. R. Ikan, *Natural Products-A Laboratory Guide*. Tel Aviv, Israel UP, 1969, 174-176.
24. J. Fernandez-Salgado, I. Ribas-Marques, "Química del corcho. XXI. Identificación de β -sitosterol y campesterol". *Acta Científica Compostelana*. **IX** (1972) 139.
25. V. Marques, F. Mata, H. Pereira, "Composição mineral dos desperdícios de cortiça proveniente da indústria de granulados". *Boletim IPF-Cortiça*, **574** (1986) 233.
26. F. Mata, V. Marques, H. Pereira, "Influência da granulometria na determinação de elementos minerais na cortiça". *Boletim IPF-Cortiça*, **569**, (1986), 68.
27. A.M. Rodrigues, "Química da cortiça-Contribuição para o seu estudo". *Boletim IPF-Cortiça*, **583** (1987) 23.
28. L. Gil, *Cortiça. Tecnologia de Processamento e Constituição Química*. DTIQ/LNETI, N^o 3, 1988.
29. L. Gil, Fabrico de Aglomerados de Pó de Cortiça com Pré-Despolimerização da Suberina. Dissertação de Mestrado em Química Orgânica Tecnológica, UNL/DTIQ, 1988.
30. C. Moiteiro, M.R. Tavares, M.J.M. Curto, Produtos químicos obtidos a partir dos condensados do aglomerado negro de cortiça - Comunicação no 11^o Encontro Anual da SPQ, LNEC, Lisboa, 1988.
31. M.L. Mata, Identificação dos Constituintes Químicos do Pó de Cortiça e Sua Valorização por Hemisíntese. Dissertação de Mestrado em Química Orgânica Tecnológica, UNL/DTIQ, 1991.
32. A. Dugelay, "A química da cortiça. Primeiros resultados - Perspectivas futuras". *Boletim JNC*, **225** e **226** (1957) 257, 293.
33. Patente Portuguesa N^o 28599 (1951) - Processo para extrair ácidos orgânicos da cortiça sob a forma de ésteres, e produtos obtidos (A. Guillemonat).
34. Patente Portuguesa N^o 27590 (1959) - Processo de separação dos ácidos gordos da cortiça em várias fracções e preparação de produtos derivados, alguns no estado puro - (A. Guillemonat).
35. Patente Americana N^o 2872464 (1959) - Obtaining cork acids - Z.R. Brown; B. Rosen.
36. B. Mesquita, "Química da Cortiça". *Boletim JNC*, (1953) 310.
37. Patente Portuguesa N^o 88239 (1990) - Processo para a produção de aglomerados do pó da cortiça sem adição de colas, mediante pré-despolimerização da suberina e posterior polimerização por prensagem e aquecimento (L. Gil).
38. J.J. Lindberg; V.A. Era; T.P., Jahiainen, "Lignin as raw material for synthetic polymers". *Applied Polymer Symposium*, **28** (1975) 269.
39. A. Guillemonat, "Le liège, matière première d'une industrie chimique". *Revue du Bois et de ses Applications*, **4(1)** (1949) 4-6.
40. H. Pereira; V. Prata, "Utilização de extractos taninosos da cortiça como fonte fenólica no fabrico de resinas". *Boletim IPF-Cortiça*, **511** (1981) 119.

* UTIMC/INETI

Estrada das Palmeiras,
2745 Queluz de Baixo

Química e Arqueologia: Os isótopos de oxigénio e a reconstituição do clima

A. J. C. CRUZ*

A datação pela carbono-14 é, provavelmente, a mais conhecida contribuição da química para a arqueologia, a qual, aliás, teve profundas consequências nos estudos arqueológicos [1,2]. No entanto, outras técnicas de datação são também actualmente utilizadas [3,5] e, por outro lado, a colaboração de modo algum se limita a esse campo [2,6-7].

Com efeito, cedo a arqueologia reconheceu o interesse da química para a resolução de problemas próprios. Desde 1796, pelo menos, encontram-se na literatura científica europeia testemunhos da relação entre as duas ciências, embora só na segunda metade do século XIX eles surjam com mais frequência [8]. Em Portugal, antes do fim de oitocentos faz-se, o estudo químico de alguns objectos pré-históricos de cobre e de bronze [9].

Actualmente essa colaboração processa-se sobretudo segundo cinco direcções: a prospecção, a datação, a caracterização dos materiais e das tecnologias, a paleoecologia e a conservação [2,6-7].

A QUÍMICA, A PALEOECOLOGIA E O AMBIENTE

O grande objectivo da paleoecologia é o da reconstituição das condições ecológicas no passado, entre as quais o clima desempenha, como hoje, um papel fundamental.

A importância dessa reconstituição para a arqueologia advém do facto de que é do ambiente que o homem extrai os meios necessários à própria vida e às suas diversas actividades materiais. No entanto, o quadro ambiental do presente não pode ser extrapolado para o passado. Na realidade, todo o planeta ao longo da sua história tem estado sujeito a variações significativas das condições ambientais. Desde o aparecimento do homem, há mais de 2 milhões de anos, a superfície do globo foi profundamente

modificada por acumulação e fusão dos glaciares, descidas e subidas do nível dos mares, desnivelamentos de centenas de metros provocados pelos movimentos tectónicos, erosão das formas do relevo, ocupação e abandono dos espaços pela vegetação e pela fauna, acção do homem. No curto intervalo de tempo (à escala geológica) decorrido desde o aparecimento do homem actual no espaço actualmente europeu, há cerca de 3 dezenas de milhares de anos, essas modificações não deixaram de ser importantes: o mar já esteve mais de 100 metros abaixo do seu actual nível, nalgumas regiões a temperatura média já foi mais de 10°C inferior à do presente, espaços outrora ocupados por lagos e por alguma vegetação são hoje desertos. Mesmo nas últimas centenas de anos é possível analisar fases climáticas bem diferenciadas [10,11].

Vê-se assim que a arqueologia levanta hoje questões de âmbito geral, muitas delas não limitadas ao passado mas, pelo contrário, bem actuais e importantes como, por exemplo, as colocadas pela relação entre o homem e o ambiente. Por isso, «*é uma evidência que aquilo a que poderemos chamar a "reconstituição do passado humano" já se não faz só com a arqueologia ou a história concebidas na sua metodologia ainda hoje habitual, e que os mais diversos investigadores, desde que pautados por um objectivo comum, podem, se unirem os seus esforços, dar passos importantíssimos na resolução de questões de uma actualidade científica enorme, que está muito para além da curiosidade sobre a realidade concretamente acontecida, e tem implicações imprevisíveis em numerosos sectores*» [12].

OS REGISTOS PALEOCLIMÁTICOS

Há sobretudo dois tipos de registos geológicos que fornecem informação

de natureza química sobre o clima no passado: os gelos dos glaciares e os depósitos de carbonatos.

Os glaciares são constituídos essencialmente por água na forma de gelo e podem ter espessuras superiores a 2 Km, as quais correspondem a períodos de acumulação de centenas de milhares de anos. No entanto, contêm igualmente gases aprisionados assim como outras impurezas solúveis e insolúveis. Enquanto a composição isotópica da água está relacionada com parâmetros climáticos, como adiante se explica, as outras substâncias presentes nos gelos permitem a reconstituição de alguns aspectos da composição da atmosfera no passado, os quais, por sua vez, dependem dos ciclos biogeoquímicos e da circulação atmosférica [13,14].

Os depósitos de carbonatos podem ter diferente origem: biológica ou inorgânica. No primeiro caso incluem-se as conchas de animais marinhos como os foraminíferos que, com o tempo, se acumulam no fundo dos oceanos. Entre os carbonatos inorgânicos contam-se os depósitos formados nos fundos dos lagos, os depósitos formados no interior dos solos das regiões áridas e os depósitos estalactíticos e estalagmíticos das grutas.

Em qualquer um dos casos, a existência dos depósitos continentais, só por si, já tem implicações climáticas — por exemplo, o crescimento das estalactites é reduzido em períodos glaciais. Além disso, nomeadamente os depósitos das grutas, contêm impurezas, como os pólenes, que permitem a reconstituição do tipo de vegetação e, indirectamente das condições ecológicas. No caso dos foraminíferos, é possível a utilização de técnicas biológicas de reconstituição climática que se baseiam nas proporções entre as diferentes espécies e estimar parâmetros climáticos como a temperatura superficial do mar.

A química tem, no entanto, um papel importante na interpretação destes depósitos. Nomeadamente, as razões isotópicas dos elementos leves estão relacionadas com parâmetros ambientais.

O FRACCIONAMENTO ISOTÓPICO DOS ELEMENTOS LEVES

As propriedades termodinâmicas das moléculas que contêm diferentes isótopos estáveis dos elementos mais leves da tabela periódica, como o hidrogénio, o carbono, o oxigénio e o enxofre, em virtude da diferença de massa, diferem ligeiramente [15].

Devido ao facto de as moléculas com isótopos mais leves terem, relativamente às moléculas com isótopos mais pesados, maior energia de vibração, os compostos formados pelos isótopos mais leves apresentam uma maior pres-

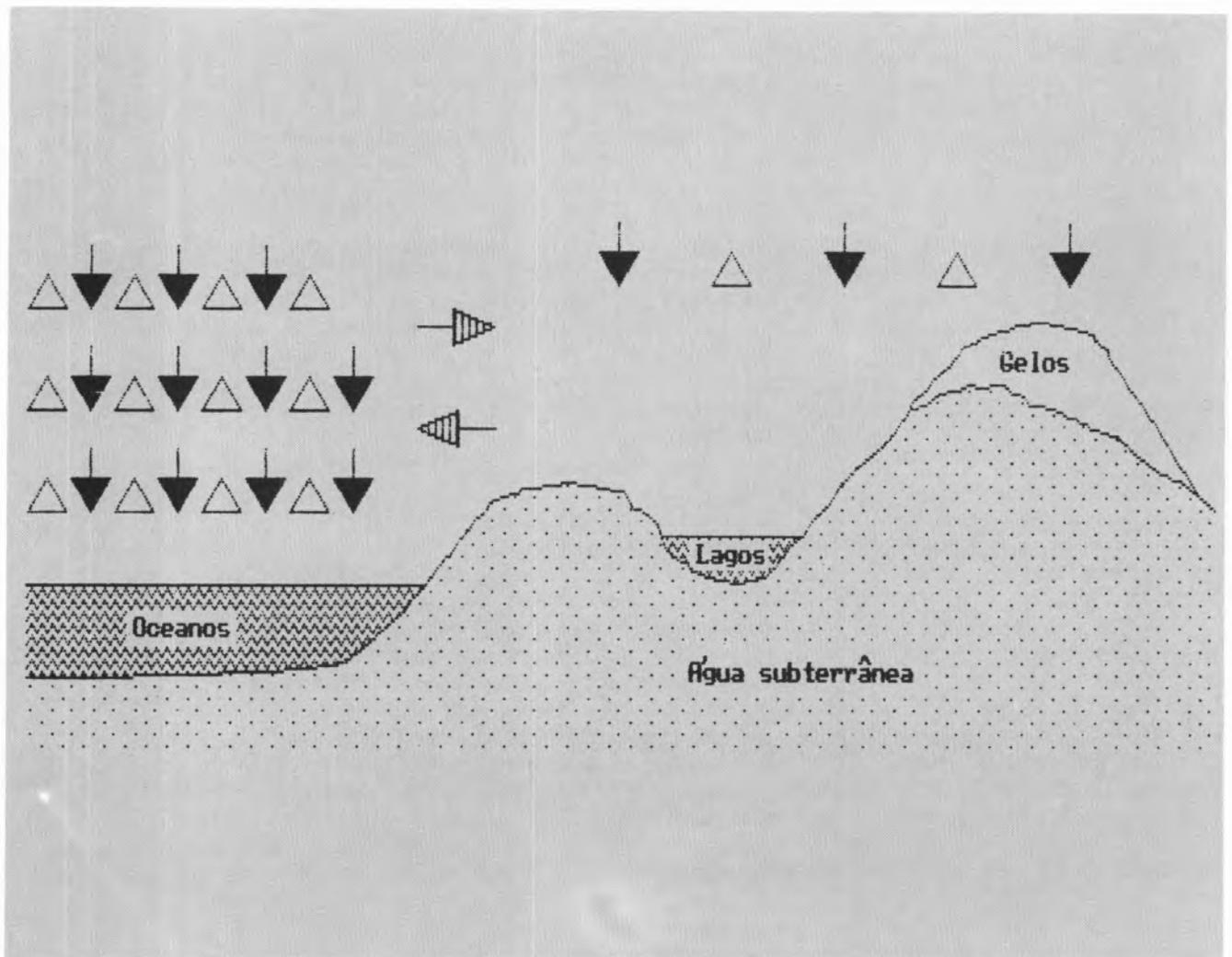
ção de vapor, pelo que, por exemplo durante a vaporização da água, a fase líquida fica, relativamente à fase gasosa, enriquecida nos isótopos de hidrogénio e de oxigénio mais pesados, ^2H e ^{18}O , e empobrecida nos isótopos mais leves, ^1H e ^{16}O . De um modo geral, durante qualquer mudança de fase, a fase mais densa fica mais concentrada nos isótopos mais pesados [16,17].

Tal separação é denominada de fraccionamento isotópico e na natureza ocorre em diferentes circunstâncias. Aqui considera-se apenas o fraccionamento do oxigénio durante o ciclo geoquímico da água e durante a precipitação do carbonato de cálcio, pois são estes os casos que, de um modo geral, mais interessam à arqueologia. No entanto, para os períodos mais recentes, a composição isotópica dos anéis das árvores fornece igualmente importantes informações de natureza paleoecológica [18].

O FRACCIONAMENTO ISOTÓPICO DO OXIGÉNIO DURANTE O CICLO GEOQUÍMICO DA ÁGUA

Um dos passos fundamentais no ciclo geoquímico da água é a evaporação à superfície dos oceanos (fig. 1). Nesse processo, devido à pequena diferença das propriedades termodinâmicas, como atrás se disse, a água do mar, relativamente à atmosfera, fica enriquecida em ^{18}O e empobrecida em ^{16}O . Ou seja: a razão $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ é maior na água do oceano do que na atmosfera. O vapor de água é, porém, parcialmente condensado, dando origem às nuvens e, posteriormente, à

Fig. 1 — Representação esquemática do ciclo geoquímico da água. Setas ascendentes: evaporação; setas descendentes: precipitação; setas horizontais: trocas oceano-continentes. Cada seta corresponde a ~30 mil km³ de água [Suzanne Daveau, *O Ambiente Geográfico Natural*, Lisboa, Imprensa Nacional - Casa da Moeda (1976)].



precipitação na forma de chuva. Durante este processo dá-se um segundo fraccionamento, ficando a água não condensada existente na atmosfera concentrada nos isótopos mais leves.

Quando se verifica a sublimação desse vapor de água forma-se gelo e este, por conseguinte, tem uma razão $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ bastante inferior à da água do mar. Assim, a diferença entre essa razão nos gelos Antárticos e num padrão de água do mar média (*Standard Mean Ocean Water* ou *SMOW*) pode ser de -50 a -60 ‰.

Esta diferença, expressa em permilagem, entre o valor da razão $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ numa amostra e o correspondente valor num padrão (normalmente, o *SMOW* no caso das amostras de águas [19]; o *PDB* ou *Pee Dee Belemnite*, um belemnite fóssil com origem na formação de Pee Dee, EUA, no caso das amostras de carbonatos [20]) é habitualmente designada por $\delta^{18}\text{O}$:

$$\delta^{18}\text{O} = 1000 \times \frac{(^{18}\text{O}/^{16}\text{O}) - (^{18}\text{O}/^{16}\text{O})_{\text{PADRÃO}}}{(^{18}\text{O}/^{16}\text{O})_{\text{PADRÃO}}}$$

Portanto, no que diz respeito ao ciclo geoquímico da água, tem-se a seguinte sequência:

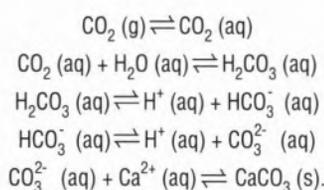
$$\delta^{18}\text{O}(\text{oceanos}) > \delta^{18}\text{O}(\text{chuva}) > \delta^{18}\text{O}(\text{neve}).$$

As diferenças energéticas entre os diferentes isótopos são tanto maiores quanto menor for a temperatura, pelo que a eficiência do fraccionamento isotópico do oxigénio aumenta com a diminuição da temperatura. Assim, a fig. 2 mostra que os últimos 10 mil anos foram consideravelmente mais quentes do que o período imediatamente anterior.

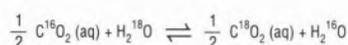
O FRACCIONAMENTO ISOTÓPICO DO OXIGÉNIO DURANTE A PRECIPITAÇÃO DOS CARBONATOS

A solubilização e a precipitação do carbonato de cálcio, que existe sobretudo na forma de calcite, são dois importantes processos químicos que ocorrem na natureza, dando origem por exemplo, à formação das grutas e à formação das rochas calcárias. Esses processos dão-se segundo uma série de equilíbrios nos quais participam as fases gasosa, líquida e sólida. Por exemplo, a precipitação do carbonato de cálcio na água do mar pode ser descrita de um modo simplificado

pelas seguintes equações [21]:



O equilíbrio entre o dióxido de carbono e a água permite a troca isotópica do oxigénio, por exemplo



pelo que a composição isotópica do carbonato precipitado reflecte a composição isotópica do meio aquoso. Porém, esse equilíbrio traduz-se por um enriquecimento da fase sólida no isótopo mais pesado. Assim,

$$\delta^{18}\text{O}(\text{carbonato}) > \delta^{18}\text{O}(\text{solução})$$

ou, numa notação frequentemente

empregue, em que o índice *c* diz respeito ao carbonato e o índice *w* (de *water*) à solução,

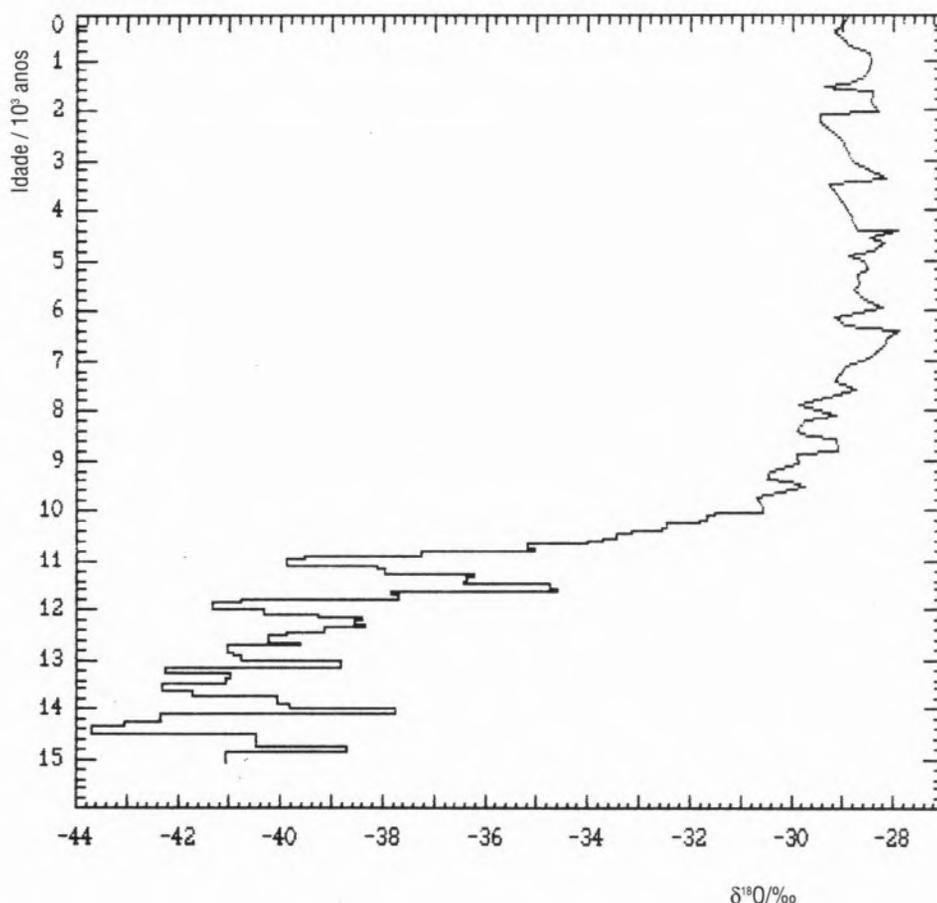
$$\delta^{18}\text{O}_c > \delta^{18}\text{O}_w.$$

O equilíbrio está relacionado com a temperatura através da expressão [22]

$$\begin{aligned} t / ^\circ\text{C} &= 16,9 - 4,38 (\delta^{18}\text{O}_c - \delta^{18}\text{O}_w) + \\ &+ 0,10 (\delta^{18}\text{O}_c - \delta^{18}\text{O}_w)^2. \end{aligned}$$

No entanto, o estabelecimento de uma escala de temperaturas para o passado não é fácil a partir dos dados químicos. Se a determinação de $\delta^{18}\text{O}_c$ é facilmente feita através da análise dos depósitos de carbonatos, dificilmente são encontrados registos, como algumas inclusões de fluidos nos depósitos calcários das grutas, que permitam a determi-

Fig. 2 — A variação de $\delta^{18}\text{O}$ nos gelos da Gronelândia nos últimos 15 mil anos (primeiros 1200 m de uma coluna de amostragem com 12 cm de diâmetro) [W. Dansgaard, S. J. Johnsen, J. Moller, C. C. Langway Jr., *Science*, **166** (1969) 377.]



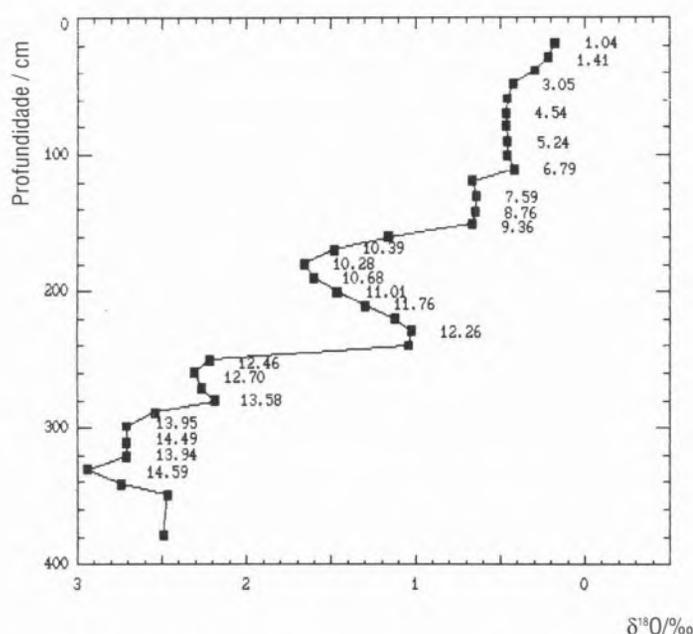


Fig. 3 — A variação de $\delta^{18}\text{O}$ nos foraminíferos (*Globigerina bulloides*) de uma coluna de amostragem recolhida no fundo do oceano Atlântico, a 3135 m de profundidade, próximo da extremidade sudoeste de Portugal, correspondente ao período posterior ao máximo da última glaciação. Os números ao lado dos pontos correspondem a datações por carbono-14 expressas em milhares de anos antes do presente [E. Bard, M. Arnold, P. Maurice, J. Duprat, J. Moyes, J.-C. Duplessy, *Nature*, **328** (1987) 791.]

nação de $\delta^{18}\text{O}_w$ correspondente ao meio aquoso no momento da precipitação.

Porém, só por si, o valor de $\delta^{18}\text{O}$ do carbonato permite obter outras informações igualmente úteis para a reconstrução climática, como de seguida brevemente se descreve.

Um dos registos mais frequentemente utilizado é constituído pelas conchas dos foraminíferos das zonas profundas do oceano onde a temperatura da água é muito estável e próxima de 0 °C. Assim, mesmo em períodos glaciares, a variação do parâmetro $\delta^{18}\text{O}$ desses foraminíferos não traduz qualquer variação apreciável de temperatura, variação que é praticamente inexistente, mas a variação da composição isotópica da água do mar. Esta, por sua vez, devido ao fracionamento existente durante o ciclo geoquímico da água, depende da quantidade de gelo depositado sobre os continentes: quanto maior for essa quantidade maior é o valor de $\delta^{18}\text{O}$ nos foraminíferos significam valores elevados de $\delta^{18}\text{O}$ implicam condições climáticas amenas. Os períodos de degelo são marcados por uma rápida diminuição de $\delta^{18}\text{O}$, motivo porque a análise isotópica das conchas dos

foraminíferos tem sido especialmente útil para o estudo e reconstituição da época que se seguiu ao máximo da última glaciação (ocorrido há cerca de 18 mil anos), o qual é bastante complexo nomeadamente pela existência de curtos períodos de agravamento climático como há cerca de 11 mil anos (fig. 3).

Nos depósitos de carbonatos continentais a interpretação dos resultados da análise isotópica é mais complicada e é necessário distinguir duas situações [23].

Quando os carbonatos são precipitados de meios que não estão sujeitos a fenómenos de evaporação, como nas regiões frias ou como no interior das grutas, a composição isotópica dos carbonatos traduz o equilíbrio existente com a água das chuvas. Desse modo o valor de $\delta^{18}\text{O}$ constitui um indicador da temperatura de condensação e, indirectamente, da temperatura à superfície do globo terrestre.

Em meios geográficos em que se verifica uma importante evaporação, como por exemplo nas regiões secas, a composição da solução na qual se dá a precipitação é sobretudo condicionada pela relação entre a afluência de água (a qual, na ausência de contribuições subterrâneas, é devida à chuva) e a evaporação. Esta conduz a um aumento de $\delta^{18}\text{O}$ na água enquanto a chuva conduz a uma diminuição. Assim, $\delta^{18}\text{O}$ constitui sobretudo um índice da relação entre a chuva e a evaporação.

AGRADECIMENTO

Agradece-se à Junta Nacional de Investigação Científica e Tecnológica (JNICT) a bolsa concedida através do

Programa Ciência para o estudo geoquímico no âmbito do qual este texto constituiu uma breve reflexão preliminar.

REFERÊNCIAS

1. J. M. Peixoto Cabral, in *Química e Sociedade*, A. Romão Dias, J. J. Moura Ramos (eds.), Lisboa, Liv. Escolar Editora — Soc. Port. Química (1990).
2. J. M. Peixoto Cabral, *Colóquio/Ciências*, **7** (1991) 58.
3. M. W. Rowe, *J. Chem. Educ.*, **63** (1986) 16
4. T. Cairns, *Anal. Chem.*, **48** (1976) 266A.
5. E. P. Manche, *J. Chem. Educ.*, **56** (1979) A273, A303, A341.
6. J. B. Lambert, *J. Chem. Educ.*, **60** (1983) 345.
7. Z. Goffer, *Archaeological Chemistry*, New York, Wiley (1980).
8. A. E. A. Werner, *Anal. Chem.*, **40** (1968) 28A.
9. A. Bensaúde, *Com. Comissão Trab. Geol. Port.*, **2** (1888) 119.
10. B. J. Skinner, S. C. Porter, *Physical Geology*, New York, Wiley (1987).
11. T. M. L. Wigley, M. J. Ingram, G. Farmer (eds.), *Climate and History. Studies in past climates and their impact on Man*, Cambridge, Cambridge U.P. (1981).
12. Vítor Oliveira Jorge, *Arqueologia*, **8** (1981) 5.
13. R. J. Delmas, M. Legrand in H. Oeschger, C. C. Langway Jr. (eds.), *The Environmental Record in Glaciers and Ice Sheets*, New York, Wiley (1989).
14. M. de Angelis, N. I. Barkov, V. N. Petrov, *Nature* **325** (1987) 318.
15. H. C. Urey, *J. Chem. Soc.* **47** (1947) 562.
16. K. B. Krauskopf, *Introduction to Geochemistry*, 2nd ed., Singapura, McGraw-Hill (1982).
17. B. Mason, C. B. Moore, *Principles of Geochemistry*, 2nd ed., New York, Wiley (1982).
18. J. Gray, in *Climate and History. Studies in past climates and their impact on Man*, T. M. L. Wigley, M. J. Ingram, G. Farmer (eds.), Cambridge, Cambridge U. P. (1981).
19. H. Craig, *Science*, **133** (1961) 1833.
20. H. Craig, *Geochim. Cosmochim. Acta*, **12** (1957) 133.
21. G. Skirrow, in *Chemical Oceanography*, J. P. Riley, G. Skirrow (eds.), vol. 1, London, Academic Press (1965).
22. J. R. O'Neil, L. H. Adami, S. Epstein, *U. S. Geol. Surv. J. Res.*, **3** (1975) 623.
23. F. Gasse, R. Têhet, A. Durant, El. Gilbert, J.-C. Fontes, *Nature*, **346** (1990) 141.

* Centro de Química-Física e Radioquímica, Faculdade de Ciências, 1294 Lisboa Codex
Endereço actual: Instituto José de Figueiredo, Rua das Janelas Verdes, 1200 Lisboa

Ambiente: A nova atitude e o desenvolvimento sustentável*

PAULO BAPTISTA**

Resumem-se os principais passos que levam ao aparecimento do conceito de Desenvolvimento Sustentável e da actual visão e atitude face ao meio ambiente e à sua protecção. É dada relevância ao papel da indústria e à reciclagem como técnica de longo prazo na redução da poluição industrial. Referem-se ainda as bases da «Actuação Responsável» e de alguns outros programas de sucesso levados a cabo nalgumas empresas, para a prossecução dos seus objectivos ambientais.

A VISÃO CLÁSSICA E A NOVA MENTALIDADE

No início da década de 70, a maioria das pessoas parecia partilhar a visão do ambiente como um espaço físico capaz de absorver virtualmente qualquer quantidade de desperdício ou resíduo que nele se depositasse. Também parecia vulgarmente ser aceite que o nosso planeta teria reservas inesgotáveis de recursos naturais, não havendo assim qualquer justificação para os poupar ou usar de forma racional. Sempre pareceu mais económico e prático explorar mais, do que recuperar e reutilizar o mesmo recurso. Logo de seguida, o boicote do petróleo apanhou os países industrializados de surpresa, e chamou indirectamente a atenção para os resultados da sua eventual escassez no futuro.

Seria errado afirmar, no entanto, que no início daquela década, não eram já conhecidos alguns efeitos da poluição e do impacto ecológico de determinados produtos químicos. Como exemplos, podem referir-se os 4000 mortos do *smog* químico de Londres de 1952, e os efeitos do DDT sobre os seres vivos, que culminaram no livro "Silent Spring", de Rachel Carson, publicado em 1962 (que muito contribuiu para o despertar duma consciência face ao ambiente nos E.U.A.). O problema era que, nesta fase, apenas os cientistas encaravam as questões ligadas ao ambiente com a devida atenção, e não o público em geral, que continuava a aderir ao "consumismo" como sinónimo

de riqueza e a manter a mentalidade do desperdício e do "usar e deitar fora", que naturalmente se traduziu numa multiplicação dos resíduos e até numa escassez e encarecimento de alguns produtos.

Em 1972, realiza-se em Estocolmo a primeira Conferência das Nações Unidas sobre o Meio Ambiente, da qual veio a resultar, em Dezembro desse ano, o Programa das Nações Unidas para o Ambiente. Os primeiros passos tendentes a uma consciencialização global em relação ao ambiente estavam dados, mas curiosamente, o pior ainda estava para vir. Tragédias como as de Seveso (1976), Bhopal (1984), o desastre do Reno em Basileia e até Chernobyl (ambos em 1986), permitiram-nos observar a extensão dos gravíssimos problemas ambientais generalizados que um acidente pontual pode causar.

Tanto Seveso como o desastre do Reno acabaram por dar origem a legislação específica ou a regulamentos que vieram reforçar aspectos de segurança industrial. Inclui-se aqui a obrigatoriedade de divulgar aos serviços de emergência a informação sobre os produtos armazenados e os cuidados a observar com aqueles durante um acidente, e a existência de sistemas de contenção de derrames ou dos agentes usados na extinção de incêndios em locais de armazenagem de produtos químicos.

Praticamente todos nós hoje em dia nos confrontamos já com informação sobre os principais problemas ambientais da actualidade: desde a poluição crescente ao efeito de estufa e à destruição da camada de ozono, passando pelas marés negras, pela desflorestação e desertificação do globo, pela instabilidade do clima que se traduz num aumento de violência das vagas de mau tempo, entre muitos outros, e já não temos dúvidas de que vivemos num Mundo ameaçado. A visão "anos 70" atrás descrita tem conduzido à degradação de todo o habitat da vida terrestre, bem como a uma exaustão acelerada dos recursos do planeta.

Portanto, há que identificar as origens dos problemas e quantificar os respectivos impactos ambientais, para pre-

servar a todo o custo a estabilidade do nosso ecossistema, salvaguardando não só o suporte de vida, mas também os recursos da Terra.

Como se sabe, as causas das tão graves e profundas perturbações induzidas pelo Homem no ambiente são diversas, passando pela poluição gerada pelos veículos e pela indústria, pelo uso intensivo de agroquímicos em grandes áreas, pelo abate das florestas, pelos esgotos e desperdícios urbanos, pelos acidentes em instalações que trabalham com produtos perigosos ou com veículos de transporte dos mesmos... Em face dum problema tão extenso e complexo, é indispensável um plano de acção que conjugue esforços individuais e colectivos no caminho adequado, apoiado numa nova mentalidade e numa participação consciente de todos.

Não se pretende aqui abordar detalhadamente a actuação a seguir em todos estes aspectos do mesmo problema, o que seria longo e fastidioso. Optamos sim, por seguir a evolução do que tem sido feito no campo da indústria, que é um dos campos onde o volume de trabalho é dos maiores e as soluções, talvez, as mais difíceis. Isto porque, com a industrialização crescente que o planeta atravessa, não podemos de modo algum permitir que os países subdesenvolvidos ou em vias de desenvolvimento passem por toda a lenta evolução que os mais desenvolvidos já percorreram, mas sim que atinjam tão rapidamente quanto possível os triunfos já alcançados por estes últimos (caso contrário, os efeitos da poluição crescente serão desastrosos).

Se bem que nos anos 80 se assista já a uma grande evolução tecnológica na área do controlo de poluição, bem como à preparação de muita legislação ambiental adequada para a indústria, que culmina nos apertados regulamentos específicos de descarga e emissão de poluentes, ao abrigo do princípio do poluidor-pagador, não parece ter sido ainda adoptada uma estratégia global de longo prazo que abarque o problema como um todo e no seu conjunto.

Um marco primordial no desenvol-

vimento da nova atitude face ao ambiente consistiu na elaboração do Relatório Brundtland, em 1987, produzido pela Comissão Mundial para o Ambiente e Desenvolvimento, no qual a protecção do ambiente é a peça chave para o alcance do Desenvolvimento Sustentável (princípio segundo o qual a satisfação das nossas necessidades actuais não deve comprometer a capacidade de as gerações futuras verem de igual modo satisfeitas as suas próprias necessidades).

A fim de que este princípio pudesse ser aplicado nas empresas, com o objectivo de melhorar a respectiva actuação em relação às questões do ambiente, a Câmara de Comércio Internacional criou uma comissão de representantes das empresas, a fim de se preparar a Carta Empresarial para o Desenvolvimento Sustentável, que contém 16 princípios de gestão a aplicar neste domínio. Estes vão desde os aspectos da avaliação dos impactos ambientais até à formação do pessoal, passando ainda pelo projecto adequado das instalações e actividades, pela investigação sobre a minimização dos impactos, pelas medidas preventivas da degradação rápida e irreversível do ambiente, pela definição de planos de actuação para situações de emergência em coordenação com os serviços especializados, pela livre transferência de tecnologia referente a aspectos de segurança e ambiente e, obviamente, pela utilização sustentável dos recursos e pela minimização da produção de resíduos e o seu adequado tratamento entre outros. A Carta Empresarial para o Desenvolvimento Sustentável foi oficialmente divulgada em 1991, na sequência da Segunda Conferência Mundial sobre a Gestão do Ambiente (WICEM II), e tem como objectivos fundamentais estimular as empresas a se comprometerem a melhorar constantemente a sua *performance* ambiental, a fornecer orientação em gestão ambiental e na definição das políticas empresariais de ambiente e, por último, a demonstrar aos governos e à sociedade de que modo a indústria no seu todo leva a sério as suas responsabilidades ambientais.

Em 1992, no Rio de Janeiro, decorre a Conferência das Nações Unidas sobre Ambiente e Desenvolvimento (também designada por "Cimeira da Terra"), exactamente 20 anos depois da primeira, em Estocolmo. Estabelecendo as ligações entre outras coisas, dois documentos de crucial importância: a Declaração sobre Ambiente e Desenvolvimento (uma carta de 27 princípios aplicáveis a todos os paí-

ses, envolvendo aspectos de ambiente e cooperação numa perspectiva global, definindo responsabilidades e obrigações no sentido de um desenvolvimento global em harmonia com a natureza), e a Agenda 21 (uma compilação de mais de uma centena de programas de acção acordados pela comunidade internacional, que se estenderão já ao Séc. XXI, em domínios tão vastos como o combate à pobreza, a modificação dos nossos padrões de consumo, o uso racional dos recursos e da energia, a protecção da atmosfera e a divulgação das tecnologias com reduzido impacto no ambiente, entre muitas outras coisas).

Concretamente em relação à indústria, no Capítulo 4 da Agenda 21 é referida a reciclagem em processos industriais como forma de minimizar a produção de resíduos e de desperdícios de embalagens, bem como a criação de mais e novos *eco-produtos*, ao lado dum uso mais eficiente da energia e dos recursos (isto é uma extensão do princípio 8 da Carta Empresarial para o Desenvolvimento Sustentável), não descurando também aspectos indirectos ligados à educação do público no sentido de orientar as suas preferências por certo tipo de produtos ou fabricantes.

A indústria terá, portanto, que conseguir a curto e médio prazo soluções para pôr em prática uma tarefa de grande envergadura: atingir a difícil meta do Desenvolvimento Sustentável, resolvendo pelo caminho problemas como a minimização das emissões de resíduos e da boa eficiência energética. Como em tudo, passar dos programas de acção à prática não é fácil, e muitas vezes os investimentos envolvidos não são acessíveis às empresas mais pequenas. Interessa conseguir soluções ambientais que continuem a permitir à indústria um desenvolvimento crescente, uma vez que o desenvolvimento por ela trazido é essencial a todos nós, e sem este, nunca o nosso planeta poderia albergar a população que nele hoje habita.

O DESAFIO DA INDÚSTRIA

Qualquer processo de produção ou transformação gera resíduos ou subprodutos indesejáveis, para os quais nem sempre é óbvio escolher um destino adequado. Muitas dessas substâncias acabam por ser incorporadas num dado efluente fabril (sólido, líquido ou gasoso), tal qual, ou após um determinado processa-

mento. Para cada estado físico do efluente em causa, deverá existir legislação adequada (consoante o país) que determine os parâmetros a cumprir em qualquer descarga, segundo regulamentos específicos, e a empresa que o conseguir garante deste modo a sua continuidade (visão anos 80).

Se bem que seja já de si bastante difícil nalguns casos cumprir esta legislação, que visa a emissão de um efluente tratado ao qual se aplica o referido princípio do poluidor-pagador (ou seja, há uma taxa a pagar por unidade de efluente descarregado, que é tanto mais pesada quanto maior o carácter poluente desse efluente, até um valor máximo admissível), veremos que mesmo assim ainda estamos bem longe das soluções ideais.

Ao que parece, desde que as emissões cumprissem com os apertados parâmetros de descarga, tudo estaria bem, poderíamos pensar. Contudo, uma análise mais profunda mostra não ser esta a solução de longo prazo. Essencialmente porque nada é feito no sentido de abrandar ou reduzir o consumo de matérias primas e além disso, com o aumento da industrialização a nível mundial, a carga poluente no meio ambiente tende a aumentar, mesmo com emissões controladas.

Poderíamos ainda pensar em soluções que passassem pela destruição total dos resíduos, mas as desvantagens são também muitas. Na maioria dos casos, aquela é simplesmente impraticável. Por exemplo, em relação às matérias inorgânicas ou minerais, tal não se pode de todo aplicar: acabaremos por obter óxidos ou outros compostos refractários, não voláteis, que exigem uma deposição adequada. Ou, mesmo quando praticável, como é o caso dos orgânicos ou organohalogenados, os produtos dessa destruição podem ser muito piores (a queima do PVC pode originar dioxina; a destruição de compostos orgânicos liberta sempre dióxido de carbono, que é um dos responsáveis pelo efeito de estufa, etc). Além disso, nada nos garante que as matérias primas usadas na fabricação dos produtos que se acabam de destruir sejam duradouras, pelo que a sua destruição seria um desperdício óbvio, como acontece com os derivados do petróleo.

Daí que cada vez mais se aponte no sentido de aplicar a reciclagem de resíduos, efluentes e subprodutos na indústria, como processo sustentável e lógico para a diminuição acelerada dos níveis de poluição do nosso planeta. Se o conse-

guirmos, alcançaremos imediatamente dois grandes benefícios para o meio ambiente: evitamos a sua contaminação crescente por emissões de substâncias que aí podem persistir por décadas e abrandamos o consumo de matérias primas e recursos não renováveis que decerto farão falta no futuro. Não menos importantes são os benefícios económicos que lhe estão invariavelmente associados: a diminuição dos custos de produção e a diminuição da especulação dos preços de algumas matérias primas.

A principal desvantagem envolvida na implementação da reciclagem na indústria é a frequente necessidade de se investir em novo equipamento adequado, e por vezes, de mudar os antigos processos produtivos. Claro que isto pode ser uma desvantagem séria, mas é necessário reconhecer que daí pode depender a sobrevivência da empresa (porque assim passa a conseguir cumprir a legislação, ou porque deixa de se lhe aplicar a condição de concorrente desleal em relação às suas congéneres que aplicaram medidas eficientes de controlo de poluição), e que após o *pay-back* dos equipamentos, a sua estabilidade financeira sairá reforçada.

Não nos esqueçamos também que é quase sempre mais fácil integrar as soluções de reciclagem nos novos projectos do que adaptar os existentes. Daí que seja também importante um empenho crescente na investigação e desenvolvimento de processos novos, adaptados de raiz à introdução dos necessários passos de reciclagem. Além disso, a reciclagem de matérias-primas valiosas pode levar à viabilização de projectos que, doutro modo, nunca se concretizariam, quer por razões económicas, quer por razões ambientais (custo do tratamento total dos resíduos).

Quer em termos ambientais, quer económicos, a reciclagem (aliada à redução da produção de resíduos na fonte) é a solução de longo prazo na minimização da poluição industrial que garante o desenvolvimento sustentável, respeitando os recursos limitados do planeta, e permitindo uma coexistência da indústria e do meio ambiente, em harmonia, de acordo com a recente visão ambiental introduzida nos anos 90.

Esta nova visão exige ainda que as empresas estabeleçam compromissos futuros, no sentido de continuamente melhorarem a sua *performance* envolvendo melhorias da eficiência energética, reduções do consumo de água e matérias-primas, bem como reduções nas emissões de poluentes.

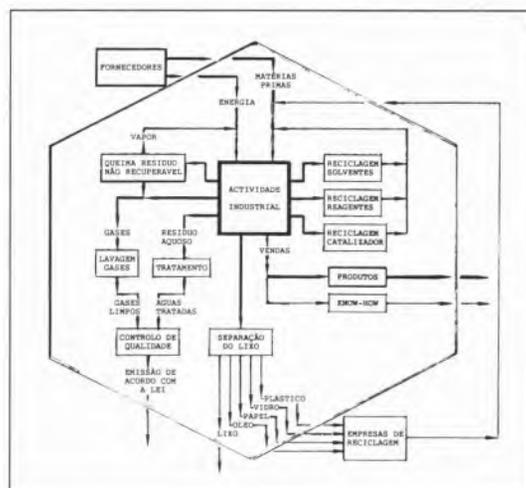


O mais famoso de todos estes compromissos (o "Responsible Care", ou Actuação Responsável) nasceu no Canadá, em 1984, e é orientado para a indústria química. É um princípio de actuação envolvendo toda a hierarquia da empresa, desde os operadores aos quadros superiores dos diversos sectores da empresa, e quem o subscrive assume um compromisso permanente com a comunidade em atingir determinadas metas com prazos (por exemplo, reduzir 10% o consumo de energia no prazo de um ano, ou reduzir em 30% as emissões de dióxido de carbono no espaço de dois anos). Este tipo de compromissos, escusado será dizer, vão sempre além do que a legislação ambiental específica exige, pelo que há um enorme esforço intrínseco a eles associado. No caso do "Responsible Care", por exemplo, as empresas ficam autorizadas a usar o logotipo aprovado correspondente, e é sempre uma boa forma de marketing. O público habitua-se a confiar naquela empresa e em particular nos seus produtos.

As empresas que aderem a este princípio ficam ainda comprometidas a tornar públicos os resultados alcançados, bem como a participar com os Governos na criação de novas leis e regulamentações ambientais, bem como a partilhar com outras empresas os seus conhecimentos e a ajudá-las a resolver os seus problemas específicos.

Em Portugal, à semelhança do que ocorre nos países mais desenvolvidos, há já um grupo de empresas interessadas em aderir ao "Responsible Care", que tem vindo a ser coordenado pela APEIPQ (Associação Portuguesa das Empresas Industriais de Produtos Químicos), que inclusivamente realizou já em Outubro de 1992 um seminário com o objectivo de dar a conhecer aquele programa e incentivar as empresas portuguesas a aderir.

Vista geral da Unidade de Reciclagem da Hovione e diagrama geral dos aspectos de protecção ambiental.



O ENQUADRAMENTO DA RECICLAGEM NA ACTUAL LEGISLAÇÃO

Se bem que a reciclagem apareça como peça chave no desenvolvimento sustentável, a sua importância na protecção do ambiente foi reconhecida antes do aparecimento daquele conceito. Passemos em revista alguma legislação relevante nesta área, com interesse para a indústria.

Em termos da legislação nacional, a Portaria 374/87 (Regulamento dos Resíduos da Indústria Transformadora) define claramente no seu artigo 4 as formas de valorização de resíduos (recuperação com reemprego, reciclagem e reutilização e ainda a regeneração de resíduos), cujas diferenças se encontram ao nível da forma com que essas substâncias são reintroduzidas no ciclo produtivo.

Mais adiante, no artigo 16 refere-se que as indústrias devem assegurar, com vista à conservação dos recursos, a reciclagem dos resíduos que originam, e no artigo 17 prevê-se a aplicação de incentivos aos estabelecimentos industriais que procedam à recuperação de matérias-primas ou à produção de energia.

A Lei de Bases do Ambiente (Lei 11/87, de 7 de Abril) reafirma os mesmos princípios, especificando claramente a aplicação de instrumentos fiscais e financeiros que incentivem a reciclagem.

Em termos comunitários, já a directiva 75/442/CEE defendia a redução da produção de resíduos, e o Segundo Programa de Acção em Matéria de Ambiente (JOC 139, 13/6/77) traçava as linhas de acção principais a seguir, que passavam pela redução da produção de resíduos, pelo aumento da reciclagem e reutilização e ainda pela rejeição segura dos resíduos inevitáveis.

EXEMPLOS EMPRESARIAIS DA NOVA MENTALIDADE INDUSTRIAL

Muitas grandes empresas aderiram já aos princípios da reciclagem, até porque têm imenso a lucrar com isso, como podemos ver.

A Dow Chemical implementou em 1986 o programa "Waste Reduction Always Pays", baseado na redução dos resíduos na fonte, aplicando ainda sempre que possível a reciclagem e a reutilização. Quando a reciclagem não é possível os resíduos são tratados biologicamente, quimicamente ou incinerados. Materiais que eram previamente perdidos deixaram de o ser, tendo-se conseguido importantes reduções nos custos de transporte e aterro desses resíduos, bem como reduções significativas nas emissões. O programa iniciou-se nas instalações da firma nos Estados Unidos, e estende-se agora a uma série de outros países.

A 3M implementou em 1975 o programa "Pollution Prevention Pays" (3P), cujo objectivo é reformular os processos de produção para eliminar as causas de poluição e, ao mesmo tempo, reciclar os sub-productos. Pouco depois, a empresa descobriu que um dos ingredientes usados na fabricação de fitas magnéticas podia ser reciclado como um bom fertilizante, poupando-se assim a poluição gerada a 500.000 litros de água por ano. Também a sucata da produção das películas (filmes) começou a ser vendida a outras firmas produtoras de objectos de

plástico. Desde o arranque do programa 3P, a firma estima ter conseguido uma redução de 500.000 toneladas de emissões de resíduos para a água, solo e ar, bem como uma poupança global de 480 milhões de dólares em materiais perdidos e custos de tratamento.

Entre nós, a Hovione, uma empresa produtora de matérias-primas para a indústria farmacêutica, adoptou também a reciclagem como medida privilegiada de protecção do ambiente. A Hovione fabrica moléculas de antibiótico e esteróide por síntese química, em meio orgânico, utilizando assim volumes apreciáveis de solventes. Estes solventes são reciclados em colunas de destilação especificamente desenhadas, a partir das águas-mães da produção. Actualmente, procede-se à recuperação do metanol e da acetona nestas colunas. O processo da acetona exige um pré-tratamento das águas-mães antes da sua destilação.

Outros solventes são provisoriamente recuperados em reactores providos de condensadores como é o caso do diclorometano (estão já previstas unidades específicas para a recuperação deste diclorometano, e de etanol). Pretende-se que todos os solventes venham a ser recuperados em equipamentos dedicados e específicos, a fim de não provocar atrasos à própria produção principal.

Além dos solventes, a Hovione procede também à reciclagem dum metal raro utilizado na produção dum catalisador de reacções de hidrogenação (catalisador este que é uma patente da própria Hovione). O metal de que estamos a falar é o ródio, que pertence ao grupo da platina, mas é 1000 vezes mais raro que esta. É extremamente importante a recuperação deste metal, por constituir um recurso tão escasso e valioso, ele próprio com aplicações importantes na protecção do ambiente (o ródio é um dos constituintes dos conversores catalíticos dos gases de escape dos automóveis modernos). O processo de recuperação do ródio envolveu anos de trabalho e pesquisa aos cientistas da Hovione, em conjunto com a firma alemã Degussa, e está em vias de ser patenteado.

A Hovione adquiriu também um incinerador de resíduos líquidos, no qual são destruídos a alta temperatura as fracções não recicláveis dos vários processos de recuperação em curso, bem como solventes usados em pequeno volume e nos laboratórios. Os gases gerados pelo incinerador são ainda usados para produzir energia sob a forma de vapor (que é usado nas próprias colunas de destila-

ção), e lavados antes da sua emissão para a atmosfera, passando ainda por um analisador contínuo, que determina a sua qualidade.

Especificamente para a execução das operações de reciclagem, a Hovione desenhou e construiu a sua Unidade de Reciclagem, que foi galardoada com o "European Award for Better Environment in Industry", na categoria de Recuperação de Resíduos. Nesta unidade, os resíduos da produção são recebidos e deles se recicla tudo o que pode voltar à produção: solventes e catalisador. O que não pode ser reciclado serve como produtor de energia no incinerador.

Com a reciclagem de solventes e catalisador, a Hovione conseguiu já uma boa redução global nos seus custos de fabrico, além de trabalhar de forma consciente para a protecção do ambiente, e tem oferecido o seu *know-how* e experiência a outras empresas que se confrontam (ou venham a confrontar) com problemas semelhantes.

Muitos outros exemplos de empresas como estas se poderiam referir, mas importa mais que o seu número cresça sempre, e que se caminhe para um verdadeiro Desenvolvimento Sustentável Global, que não pode ser alcançado sem que os recursos do nosso pequeno planeta sejam inteligentemente geridos e continuamente reaproveitados. Quem o fizer sabe que está a contribuir para a causa da Humanidade, que deverá entrar no novo milénio com uma mentalidade face ao ambiente que os anos 90 ajudaram a delinear na Cimeira da Terra.

**Este artigo, ainda que em parte derivado da conferência "A Solução de Longo Prazo para a Protecção do Ambiente", apresentada pelo autor durante as Jornadas da Inovação Tecnológica na Indústria Química, em Novembro de 1992, inclui muita informação adicional que então não foi abordada, por limitações de tempo.*

** HOVIONE

BIBLIOGRAFIA

1. J. O. Willums, U. Golüke; *From Ideas to Action - Business and Sustainable Development*; International Chamber of Commerce / Ad Notam Gyldendal, 1992.
2. *The Business Charter for Sustainable Development*; International Chamber of Commerce, Publ. 210/356A, 1991.
3. F. McLeod, *Chem. Engineer*, **530** (Nov. 1992) 21.



Q De Qualidade.



A qualidade é uma distinção que se obtém com mérito próprio.

Seguindo uma filosofia de rigor e disciplina com meios técnicos e humanos, em perfeita conjugação foi possível a certificação de qualidade do laboratório da EPAC como laboratório apto a efectuar ensaios em vários tipos de cereais e alimentos para animais.

Este reconhecimento é ainda mais importante dada a sua abrangência no espaço europeu uma vez que uma certificação num estado membro é suficiente para que ela seja aceite em toda a comunidade.

Reconhecido internacionalmente pela sua capacidade científica e rigor, e por várias vezes consultado por prestigiados organismos externos, o laboratório da EPAC, distingue-se com mérito e representa ao mais alto nível a filosofia de qualidade da empresa.



LABORATÓRIO
ACREDITADO
CERTIFICADO N. 93 / L. 89
EMITIDO PELO
INSTITUTO PORTUGUÊS
DA QUALIDADE

EPAC

EMPRESA PARA AGROALIMENTAÇÃO E CEREAIS, SA

Há Uma Terra Que Nos Une

O primeiro espectro das protuberâncias solares

M. N. BERBERAN E SANTOS *

ANTECEDENTES E PREPARATIVOS

O eclipse total do Sol de 18 de Agosto foi o grande fenómeno celeste de 1868 (ver Destaque I). Era esperado com impaciência por astrónomos e físicos, pois seria a oportunidade de aplicar pela primeira vez a recente técnica de Análise Espectral ao Sol eclipsado. Esta técnica, desenvolvida em grande medida por Bunsen e Kirchhoff, mostrara já o seu valor ao levar à descoberta de quatro novos elementos químicos (Quadro I), bem como à identificação de ferro, cálcio, magnésio, sódio, níquel e crómio na atmosfera solar, o que despertara um interesse generalizado.

Os estudos físicos propriamente ditos tinham duas finalidades principais: em primeiro lugar, proceder ao estudo das protuberâncias (ver Destaque II), para determinar a sua dinâmica, estado físico e composição química - tentar-se-ia pela primeira vez obter o seu espectro de emissão; em segundo lugar, pretendia-se obter o espectro da camada gasosa acima da fotosfera. Se a teoria de Kirchhoff (sol constituído por um globo sólido incandescente rodeado por uma atmosfera gasosa mais fria) fosse correcta, essa camada fria, que segundo este produzia as riscas de Fraunhofer, apresentaria por si só um espectro semelhante mas invertido, isto é, em que as riscas de absorção se tornavam riscas de emissão. Este espectro de emissão deveria ser observável imediatamente antes e imediatamente depois da totalidade, quando a Lua deixasse ver apenas uma fracção da atmosfera acima do bordo solar.

O rigor dos cálculos astronómicos de então permitia prever com bastante exactidão os locais onde o eclipse seria total (faixa de totalidade), bem como a hora e a duração do mesmo para cada local. Tais informações constavam em particular dos Almanques Náuticos e Anuários de Observatórios, publicados com antecedências superiores a um ano. Os pontos mais acessíveis da faixa de totalidade e onde o eclipse teria a maior duração (de 5 minutos e 10 segundos a 6 minutos e 47 segundos) situavam-se

na Índia, na Península de Malaca e no sul do Camboja [1-3].

Como em 18 de Agosto se estaria em plena monção de sudoeste, as zonas costeiras à sua mercê ficavam desde logo postas de parte como possíveis pontos de observação. Era o caso de Goa, onde o eclipse foi afinal observado, num dia com nuvens mas sem uma gota de chuva [4] (Figura 1).

Eclipse do sol total e visível em Goa. No dia 18 do corrente haverá eclipse do sol, e será total e visível em Goa. O *Almanach do céu de Goa* falando deste eclipse, diz que começará às 7 $\frac{1}{2}$ horas da manhã, passará a ser central às 8 horas e 24 minutos, será central ao meio dia às 10 horas e 8 minutos, deixará de ser central às 11 horas e 49 minutos, e acabará aos 44 minutos depois do meio dia. Uma carta de Bombaim diz-nos, que o paquete ahi chegado no dia 30 de julho, trouxe os professores e astrónomos allemães Spoer, Tietzen, Engelman, e o professor que dizem ser inglez mr. C. Koppe, os quaes vem expressamente da Europa estudar os phenomenos do proximo eclipse.

Foram várias as nações europeias que organizaram expedições científicas para o estudo do eclipse. Os astrónomos vienenses Weiss e Von Oppolzer¹,

Eclipse total do Sol - (Observação feita em Calangute). Como estava anunciado para o dia 18, verificou-se o eclipse total do sol. Era geral a expectação e a curiosidade para a observação deste phenomeno: desde o sabbado até o burquez e o pescador esperavam-no com ansiedade à hora marcada. No domingo proximo precedente, em varias freguesias, os parochos tinham tido a curiosidade de annunciar ao povo, na cadeira da estação, o eclipse, descrevendo todos os phenomenos esperados. Nasceu pois o dia 18, soprava rijo o vento e o horizonte estava toldado de nuvens; mas, felizmente, às 7 horas da manhã, algumas restias do sol cobadas por entre as nuvens vinham doirar a terra; o sol estava brilhante, e, ainda que, nuvens vaguetando de um a outro lado vinham interceptar, de vez em quando, o disco do sol, toda via era possível alguma observação. Começou o eclipse às 7h 30 m. A.M. Foi total às 8h. 23 m. A.M. Deixou de ser total às 8h.28 m. A.M. Acabou o eclipse às 9h.48 m. A.M. Foi pois total o eclipse 5 minutos - Neste intervalo o disco do sol estava inteiramente eclipsado, apresentando apenas allumiado o rebordo sueste no tamanho da estrella matutina-então houve escuridão similhante ao lusco-fusco muito denso; e viram-se tres estrelias a olho nu. Durante este tempo algumas mulheres e crianças foram tomadas de pânico e gritaram fortemente mas, em geral, todos gostaram de ver o phenomeno e queriam pelo menos que durasse umas 4 horas.....

Figura 1 - Notícias publicadas na imprensa goesa, respectivamente em "O Ultramar" (Margão) de 13/8/868 e em "Índia Portuguesa" (Orlim) de 20/8/868.

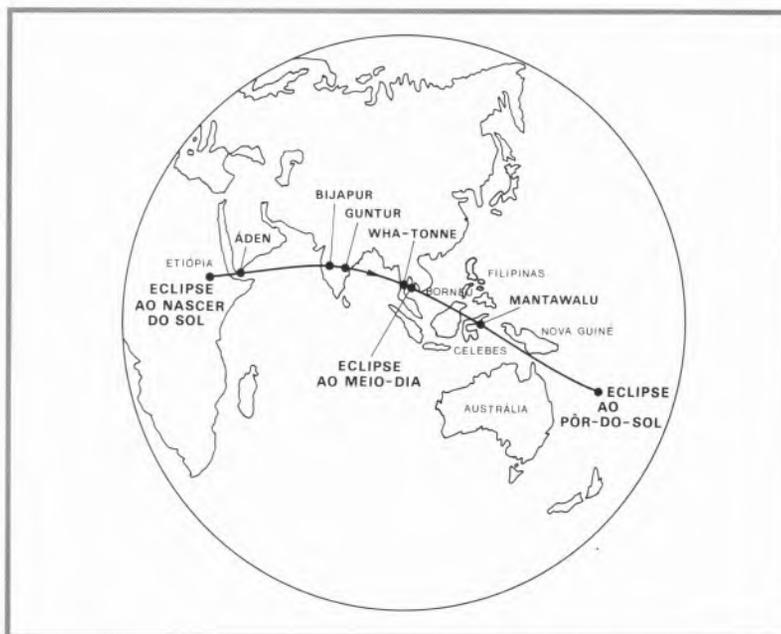
I. Eclipse total do Sol de 18 de Agosto de 1868

O eclipse de 18 de Agosto de 1868 foi considerado o eclipse do século, pela sua duração excepcionalmente longa, que atingiu um máximo de 6 minutos e 47 segundos (sendo o limite teórico de 7 minutos e 40 segundos). Um eclipse do Sol é tanto mais longo quanto maior for o diâmetro aparente (isto é, visto da Terra) da Lua em relação ao diâmetro aparente do Sol. Este último é mínimo no início do Verão, quando Terra e Sol estão o mais afastados possível. Em 18 de Agosto, o diâmetro aparente do Sol estava pois próximo do mínimo, nesse ano atingido a 1 de Julho. Por outro lado, e mais importante, a Lua atingira nesse mesmo dia o perigeu, isto é, a menor distância à Terra, pelo que o seu diâmetro aparente era quase o máximo. Além disso, as regiões onde se daria o eclipse encontravam-se nos trópicos, outro factor favorável a uma duração elevada. A região varrida pelo cone de sombra, dita faixa de totalidade, encontra-se indicada na

Figura 2, redenhada do *Nautical Almanac* britânico para 1868. Tal faixa, com uma largura variável com a longitude, mas da ordem dos 250 Km, corresponde à região varrida pela intersecção do cone de sombra da Lua com a superfície terrestre. Num dado ponto da faixa, o eclipse será total enquanto aquele se mantiver na sombra da Lua. Essa sombra desloca-se sobre a superfície terrestre, de Oeste para Este, a uma velocidade aparente maior ou igual a 1600 Km/h. Com efeito, o movimento da sombra resulta essencialmente da composição da rotação da Terra com o movimento lunar em torno desta (ambos em sentido directo), dependendo também do grau de obliquidade da incidência e ainda da latitude. Resulta destes dois últimos factores que a velocidade mínima se obtém sobre o equador e para incidência vertical (Sol no zénite do lugar). Assim, em Áden, onde o eclipse ocorreu pouco depois do nascer do Sol, a totalidade teve uma duração de 3 minutos e meio. Na Índia, onde foi observado ainda de manhã, teve já uma duração de cerca de cinco minutos e meio. E na

acompanhados do Tenente de Marinha Rziha, encarregado das medições espectroscópicas, escolheram as imediações de Áden como ponto de observação [5]. Também a expedição fotográfica prussiana, constituída pelos astrónomos Tiele, Vogel², Zenker e Fritsch se estabeleceu em Áden [6]. Mas foi na Península Hindustânica que se concentrou a maioria das expedições. De um total de sete, todas equipadas com espectroscópios, cinco eram inglesas [2,3,7-9]: em Jamkhandi, a da Royal Society, dirigida pelo Tenente Herschel; em Guntur o Major Tennant, da Royal Astronomical Society e do Governo da Índia, comandando um destacamento de sapadores; em Bijapur os Capitães Haig e Tanner, e o matemático do Colégio do Decão Kero Laxuman; em Mongoli (aldeia seis milhas a este de Mulwar, por sua vez 18 milhas a sul de Bijapur) o astrónomo Chambers, do observatório de Bombaim; em local indeterminado o astrónomo Pogson, do observatório de Madrastra. Das duas restantes expedições, uma era prussiana, composta pelos astrónomos Spörer, Tietjen, Engelmann e Koppe (em Mulwar) e a outra francesa, do Bureau des Longitudes e Academia das Ciências de Paris, composta pelo físico Janssen e pelo Aspirante Rédier (em Guntur).

Na Península de Malaca, numa praia a cerca de sessenta léguas de



Banguécoque, instalou-se a principal expedição francesa, constituída entre outros pelos astrónomos Stephan, Tisserand e Rayet do Observatório Imperial, estando Rayet incumbido das observações espectroscópicas. Finalmente, em Mantawalu, ilha do golfo de Tomini (Celebes), o astrónomo Oudemans, de Amsterdão, na companhia de espanhóis idos expressamente das Filipinas, realizou várias observações não espectroscópicas [10]. O eclipse foi ain-

Figura 2 - Linha de centralidade do eclipse de 18 de Agosto de 1868, indicando-se alguns dos pontos de observação.

da estudado e descrito em muitos outros pontos, nomeadamente na ilha de Bornéu, pelo governador inglês de Labuan, e a bordo de vasos mercantes e de guerra de várias nacionalidades, que se encontravam espalhados ao longo da faixa de totalidade. O fenómeno era esperado e sabia-se da sua singularidade.

Descrição do eclipse total do Sol de 18 de Julho de 1860, presenciado por C. Wolf em Espanha [2]

Península de Malaca, onde ocorreu perto do meio-dia e do equador, teve a duração máxima de 6 minutos e 47 segundos. Em Labuan, no noroeste de Bornéu, ocorreu já de tarde, mas ainda muito perto do zénite. Finalmente, nas Celebes, o Sol estava mais próximo do ocaso, embora ainda alto no céu. Apesar de em Áden o eclipse se ter dado pouco depois do amanhecer, e de nas Celebes ter acontecido de tarde (pelas 14.20), a diferença temporal real entre os dois acontecimentos foi muito mais pequena: cerca de 2 horas e 45 minutos, tempo necessário para o cone de sombra passar de um ponto a outro.

Durante a totalidade, o céu não se apresenta completamente escuro, sobretudo junto ao horizonte, devido à luz que penetra fora da zona de totalidade e é dispersa pela atmosfera para o interior desta. O grau de claridade durante a totalidade é contudo

Déjà la lune a mordu le disque du soleil ; l'astre brillant est réduit à un mince croissant. Autour de nous, les bruits cessaient peu à peu, comme au crépuscule du soir, et le ciel était envahi d'une teinte lugubre, passant par tous les tons du jaune jusqu'au violet, et rendue plus triste encore par les riches couleurs dont s'empourprait la brume à l'horizon : on eût dit que le soleil se couchait aux quatre coins du ciel. Puis partout silence complet, le dernier rayon de soleil venait de disparaître. Et alors, sur nos têtes, comme si un rideau était tiré tout à coup, éclatait dans sa magnificence le splendide spectacle de l'éclipse. Autour du disque de la lune, de la teinte sombre du bronze, une éblouissante couronne d'argent d'où s'élançaient des rayons ou des gloires, en quatre grands jets rectilignes, avec d'autres en forme de lyre. Puis, sur cette couronne, des flammes roses d'une richesse indescriptible de nuance, dont la principale semblait trembler au souffle d'un vent léger. Peu à peu le mouvement de la lune, de l'ouest à l'est, couvrait ces flammes, et, de l'autre côté, découvrait une bordure de perles roses ou de nuages moutonnés, courant tout le long de son disque. Puis, un cri universel sortait à la fois de toutes les poitrines : le soleil avait lancé son premier rayon comme un éclair, l'éclipse était finie.

muito variável, dependendo da altura do ponto de observação, da orografia, da proximidade do local em relação à linha de totalidade (centro da oval de sombra) e do estado

dispersivo da atmosfera durante o eclipse. Pode no entanto ser tal que seja impossível ler e distinguir objectos, como sucede numa noite sem luar.

RELATOS DAS EXPEDIÇÕES PRINCIPAIS

A expedição austríaca largou de Trieste, porto de mar do Império Austro-Húngaro, rumo a Alexandria [5]. Daí seguiu para Suez presumivelmente de comboio, a partir do Cairo (o canal só seria inaugurado no ano seguinte), onde tomou novo barco para Áden. A viagem pelo Mar Vermelho foi difícil de suportar, pela conjugação de humidade e temperatura elevadas, e da frequente falta de vento. Em Áden, os astrónomos (austríacos e prussianos) foram bem acolhidos pelo governador inglês, tendo-lhes sido disponibilizados homens da guarnição e serviços nativos. A conselho de oficiais ingleses, escolheu-se como ponto de observação uma elevação não longe da cidade. A ligação logística era feita por uma caravana diária de dromedários e solípedes. No dia do eclipse, que em Áden se dava logo após amanhecer, o céu matinal apresentava-se muito nublado. As observações só puderam fazer-se durante pequenas aberturas, e, embora se tenham observado e medido as protuberâncias, a análise espectral das mesmas foi um fracasso. A missão prussiana, por seu lado, pôde tirar três fotografias, das quais apenas uma (Figura 3) saiu em boas condições [3].

A expedição da Royal Society, dirigida pelo Tenente Herschel (1837-1921, filho e neto de astrónomos distintos),

estabeleceu-se em Jamkhandi, no planalto do Decão. Uma vez chegado à Índia, Herschel estudara a distribuição espacial da precipitação durante o mês de Agosto e concluíra que Bijapur e Jamkhandi eram dos locais onde menos chuva caía. Os oferecimentos de hospitalidade por parte de um chefe local, residente em Jamkhandi, levam-no a optar por esta localização. O grosso da expedição parte finalmente de Bangalore em 7 de Julho, transportando os instrumentos, um observatório desmontável e restante equipamento. Para percorrer as 390 milhas que a separam de Jamkhandi, demora 31 dias, o que Herschel considera aceitável, dada a inexistência de estradas e o tempo adverso. Ele próprio parte a 1 de Agosto, para chegar a 14. Há que montar o observatório e testar os instrumentos, quase sempre com céu nublado. Por fim, chega o dia do eclipse. Quinze segundos antes da totalidade, uma espessa nuvem encobre o Sol. Mas alguns segundos depois da totalidade, o Sol eclipsado estava de novo visível e distinguia-se uma longa protuberância "em forma de dedo" [9,11].

Apontando-lhe a luneta, a imagem espectroscópica foi imediatamente a de três riscas brilhantes (vermelha, laranja e azul), sem qualquer espectro contínuo sobreposto. Emocionado, Herschel grita ao assistente "vermelho, verde, amarelo", pensando ter dito as cores correctas. Após algumas hesitações, e apesar das nuvens que se sucediam, interrompendo de quando em quando as observações, Herschel procedeu à determinação do

comprimento de onda das riscas, embora sem grande rigor. Vermelha e azul seriam próximas das riscas C e F do hidrogénio, respectivamente, e a laranja parecia coincidir com a risca D do sódio. Mas para o grau de precisão evidenciado, a identificação certa das riscas observadas com as riscas de referência não era possível. Concluiu-se no entanto que as protuberâncias eram formadas por gases incandescentes.

Foi nas ruínas da antiga cidade fortificada de Bijapur que a missão de Haig se instalou. A estação de observação escolhida era uma sólida torre de 20 metros de altura e quase outros tantos de diâmetro, no alto da qual ainda se encontravam dois velhos canhões, um dos quais com mais de 9 metros de comprimento. O vento era muito forte, o que prejudicou bastante as observações, tendo chegado mesmo a derrubar uma luneta. O início da totalidade, pelas 9 da manhã, não foi visível, devido à interposição de nuvens. Mas pouco depois o Sol eclipsado apresentava-se a descoberto e Haig de imediato aponta o pequeno espectroscópio portátil de que dispunha a duas protuberâncias próximas, cujo espectro, idêntico, apresenta duas riscas, uma vermelha e outra dourada. O espectro da coroa, também observado, era de fraca intensidade mas contínuo.

A missão germânica, em Mulwar, teve pouca sorte com as condições atmosféricas, e apenas pôde ver o Sol eclipsado durante escassos cinco segundos, só tendo tido tempo para medir a dimensão angular das protuberâncias. Também o astrónomo Chambers nada conseguiu observar, em consequência de um manto cerrado de nuvens. Por sua vez, Pogson observou igualmente o espectro de emissão das protuberâncias, observando F, D ou próxima de D, e duas outras riscas entre D e E, mas não parece ter publicado os seus resultados.

A expedição dirigida pelo Major J.F. Tennant (1829-1916) obteve também resultados positivos. As observações espectroscópicas, levadas a cabo pelo próprio Tennant, incidiram sobre a grande protuberância, a que chamou "The Great Horn". O seu espectro apresentava várias riscas, uma vermelha, uma laranja, outra verde, múltipla, e ainda outra, difícil de ver, no azul. A risca vermelha exerceu sobre ele um fascínio especial: "One line in the red was so beautiful that it needed an effort to turn my attention to anything else" [7]. A atribuição das riscas foi mais uma vez algo incerta: C, a vermelha; D,

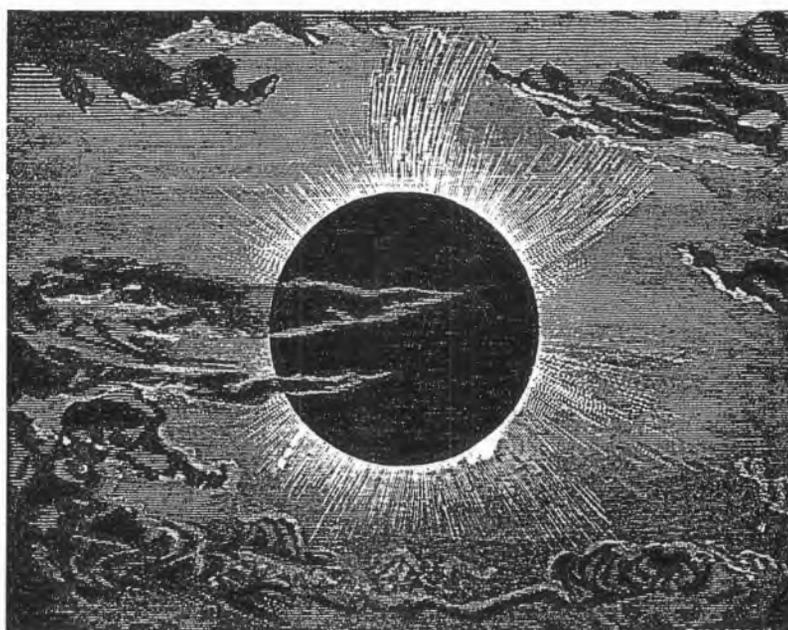


Figura 3 - Aspecto do eclipse, tal como se apresentou em Áden. Gravura executada a partir das fotografias de Vogel e Fritsch [2].

HÁ TRÊS GERAÇÕES QUE PORTUGAL CRESCE CONNOSCO

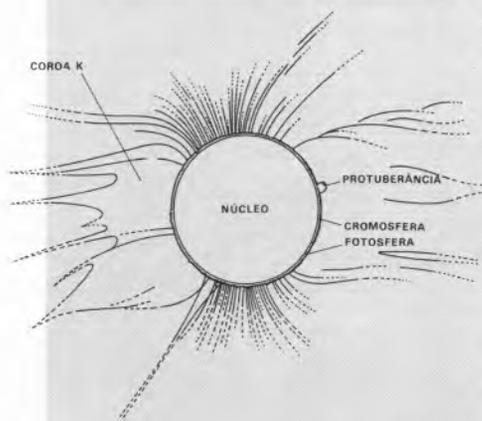


Desde finais do século passado que milhares de portugueses nascem e crescem com a qualidade Nestlé. Qualidade que os acompanha a partir dos primeiros passos, através da mais variada gama de produtos alimentares. E qualidade que, geração após geração, os leva a preferir sempre Nestlé, contribuindo para que, também nós, vamos crescendo com os portugueses. Nestlé. Crescendo consigo.

Nestlé Portugal, S.A.

II. O Sol

O Sol tem uma estrutura e dinâmica complexas, ainda incompletamente conhecidas. É constituído quase exclusivamente por hidrogénio e hélio; em percentagem molar, tem-se 90% de hidrogénio, 9% de hélio e 1% dos restantes elementos (principalmente carbono, azoto, oxigénio, néon, magnésio, silício e ferro). O seu núcleo é extremamente denso (cerca de 10^2 g/cm³) e encontra-se a uma temperatura de 15 milhões de Kelvin. É aí que o hidrogénio é lentamente convertido em hélio, numa sequência de



Representação esquemática da estrutura solar

reações nucleares. A energia libertada sob a forma de radiação difunde-se até à região superficial do Sol, num processo que demora vários milhares de anos. Ao atingir esta, escapa-se finalmente para o espaço, chegando por exemplo à Terra em 8 minutos. A camada solar superficial, ou fotosfera, a partir da qual os fótons saem para o exterior e que é pois a superfície visível do Sol, tem uma densidade muito baixa ($\sim 10^{-4}$ atm) e uma temperatura de aproximadamente 5800 K, emitindo um espectro contínuo muito semelhante ao do corpo negro a essa temperatura. Essa emissão é sobretudo devida ao ião H⁺, que se forma com facilidade dada a abundância de átomos de hidrogénio e de electrões livres provenientes de metais ionizados. Esta emissão contínua apresenta contudo diminuições abruptas de intensidade a certos comprimentos de onda. São as chamadas riscas de Fraunhofer (observadas por este em 1814), em número superior a 26.000 mas das quais apenas um pequeno número é relativamente marcado. Estas riscas devem-se à presença de uma zona exterior mais fria, que absorve radiação mas emite menos do que a 5800 K. As riscas escuras correspondem assim aos comprimentos de onda de absorção dos átomos (e moléculas diatómicas) presentes nessa zona mais fria. O espectro solar observado na Terra tem ainda outras riscas escuras adicionais na região do visível, ditas telúricas, pois são devidas à absorção pelos gases atmosféricos terrestres, sobretudo

O₂ (transições singuleto-triplete) e H₂O (transições vibracionais). A temperatura da atmosfera solar decresce com a altitude até ao valor mínimo de 4200 K a algumas centenas de quilómetros, para recomeçar a subir depois, atingindo 10.000 K a cerca de 2000 Km. A camada entre o mínimo e os 10^4 K é designada por cromosfera (nome devido a Lockyer), pois tem uma cor rósea, resultado da predominância no visível da emissão correspondente à risca C(H α) do hidrogénio atómico. O espectro de emissão da parte inferior da cromosfera, observável por breves instantes imediatamente antes e imediatamente depois de um eclipse total, e dito por isso espectro-relâmpago, reproduz qualitativamente o espectro de Fraunhofer, mas em riscas brilhantes. Acima da cromosfera tem-se a última e mais extensa camada: a coroa. Extremamente rarefeita ($< 10^{-12}$ atm), a sua região interna (coroa K), que se estende até cerca de 2 raios solares (1.4 milhões de Km) tem uma temperatura elevadíssima: cerca de 2 milhões de kelvin. Nessas condições, predominam os electrões livres e os elementos em graus de ionização elevados, isto é, tem-se um plasma. O hidrogénio e o hélio, por exemplo, encontram-se predominantemente na forma H⁺ e He²⁺, enquanto que ferro, níquel e cálcio estão, entre outras, nas formas Fe¹³⁺, Ni¹³⁺ e Ca¹²⁺. O espectro da tênue emissão da coroa K é contínuo, sendo o resultado da dispersão da radiação fotosférica pelos electrões livres. Contudo, não apresenta riscas de Fraunhofer, pois como a temperatura é muito

a laranja; e talvez b (magnésio), a verde. Concluiu assim que "a protuberância era formada por vapores incandescentes, compostos por hidrogénio, sódio e magnésio". Verificou-se ainda que a emissão era despolarizada, ao contrário da da coroa, que apresentava além disso um espectro contínuo. Foram obtidas seis fotografias do Sol eclipsado, com protuberâncias bem visíveis (Figura 4).

A algumas centenas de metros de Tennant estava a estação de observação de Pierre Janssen (1824-1907). Viajando de França a Madrastra no paquete "L'Impératrice", da Mala Imperial, e depois em novo vapor para Masulipatão, destino previsto da expedição, Janssen acabou por escolher Guntur, mais para o interior. Situada a meia distância entre os contrafortes dos Gates Orientais e a costa do Índico, permitiria em princípio evitar quer as brumas marítimas, quer as nuvens de montanha. Guntur havia sido efémera possessão francesa no Séc. XVIII, e ainda aí viviam descendentes dos colonos iniciais, um dos quais, rico comerciante de algodão, pôs o terraço da sua casa à disposição de Janssen para que nele fosse montado o equipamento [12]. Segundo nos relata Janssen, o tempo apresentou-se excepcionalmente chuvoso e enevoado até à véspera. Felizmente, a 18 de Agosto o dia nasceu com o céu quase limpo, e assim se manteve até ao termo do eclipse. Em estado de grande tensão, Janssen e os seus colaboradores, em que se incluíam fami-

liares do anfitrião, realizavam afanosamente as medições programadas à medida que o eclipse se ia desenrolando. A observação do bordo do disco solar com o espectroscópio (através da luneta), apresentava o espectro de riscas escuras sobre fundo brilhante característico. Mas eis que se atinge a totalidade, e se fazem trevas. No mesmo instante, o espectro muda por completo. Sobre um fundo cinza claro, destacam-se agora, nítidas, uma, duas cinco ou seis riscas brilhantes de várias cores: vermelha, amarela, verde, azul, violeta [12]. O espectro é idêntico para duas protuberâncias que se destacam do disco momentaneamente negro. Uma tem a forma de uma longa língua de fogo. A outra, assemelha-se a uma cadeia de montanhas nevadas, vista ao pôr-do-sol [12]. Estava atingido o objectivo da expedição. E era tempo, pois o céu voltava a cobrir.

Dos resultados obtidos, Janssen concluiu que as protuberâncias eram gasosas, e de composição constante: havia observado o mesmo espectro em duas protuberâncias separadas de muitos milhares de quilómetros. Deduzia ainda que o hidrogénio era o elemento dominante pois as riscas vermelha (res-



Figura 4 - Fotografia do Sol eclipsado, obtida em Guntur (tempo de exposição: 5 s) [7].

elevada o efeito de Doppler sobre o contínuo anula-ascompletamente. Além do contínuo fotosférico, observam-se riscas de emissão de metais (e alguns não metais) em estados de ionização elevados (Quadro II).

As protuberâncias solares são elevações de matéria gasosa ($\sim 10^{-8}$ atm) a grande altura (vários milhares de quilômetros), com temperaturas próximas das cromosféricas, constituindo como que prolongamentos temporários desta no interior da coroa. Nos eclipses, apresentam-se como zonas luminosas no bordo da Lua, destacando-se contra o céu escuro. As protuberâncias formam-se frequentemente como gigantescos arcos ou séries de arcos de matéria cujas bases mergulham na fotosfera e que depois evoluem lentamente, durante semanas ou meses (protuberâncias estacionárias), até que terminam por ejeções bruscas e violentas, com velocidades que atingem centenas de quilômetros por segundo e temperaturas muito elevadas. Estas erupções são consequência da reorganização dos campos magnéticos que sustentavam as protuberâncias. Pensa-se que a energia libertada no decurso das ejeções de matéria poderá ser a causa do aquecimento da coroa. As protuberâncias normalmente observadas são casos raros e extremos que envolvem grandes massas de matéria, provindo a maior parte da energia de fenómenos análogos mas em menor escala e muito mais frequentes.

sem dúvida as C e F de Fraunhofer. Logo no dia seguinte envia um telegrama ao presidente do Bureau des Longitudes (que chega a 22), talvez a primeira notícia recebida na Europa sobre o eclipse: "Eclipse observed, Protuberances, Spectrum very Remarkable and unexpected, Protuberances gaseous nature" [13].

Tal como Guntur, a praia de Wha-Tonne, na costa leste da península de Malaca, estava abrigada da monção de sudoeste por uma cadeia montanhosa. O local era inóspito, quase sem vida animal e sem água potável. Uma densa floresta pantanosa chegava até à praia, banhada pelas águas tépidas do Golfo de Sião. Por ordem do rei siamês, Rama IV^o, haviam sido erguidas uma paliçada e algumas casas de bambu para alojar os convidados europeus. Um observatório temporário fora construído pelos carpinteiros da canhoneira "Le Frêlon", que precedera a missão científica. Desde o dia 14 de Agosto, o rei do Sião, que no dizer zombeteiro de Rayet "se piquait fort d'astronomie", instalara-se com a sua numerosa corte a um quilómetro a norte da expedição francesa. O cenário era singular, naquele local habitualmente deserto: para além do intenso movimento em terra, fun-

deavam no mar quinze navios a vapor do rei, e ainda o navio de transporte francês e um barco inglês. No dia do eclipse, as várias fases do mesmo (contactos) foram saudadas por outros tantos tiros de canhão, comandados pessoalmente por Sua Majestade. Segundo Rayet confessa com alguma malícia, os astrónomos franceses tinham previamente comunicado esses instantes ao astrónomo real e chegado mesmo ao ponto de acertar um dos relógios de Rama IV [3].

O dia 18 amanhecera com o céu limpo. Mas às nove horas o Sol desaparecera por detrás de nuvens carregadas de chuva, e o tempo piorava cada vez mais. O primeiro contacto foi invisível. No entanto, dez minutos antes do segundo contacto (início da totalidade), uma aberta descobria o Sol. Felizmente, essa aberta perdurará até ao terceiro contacto (fim da totalidade), permitindo a observação completa da parte mais importante do eclipse.

Os resultados espectrais obtidos pelo jovem astrónomo Georges Rayet (1839-1906) foram, de todos, talvez os mais completos, o que se deveu à conjugação de quatro factores: maior abertura do telescópio usado (um reflector de 20 cm); espectroscópio relativamente pouco dispersivo; maior duração durante a totalidade; maior duração da totalidade. Assim que se dá a obscuridade total, Rayet dirige a fenda do espectroscópio para a protuberância "em forma de chifre", e vê aparecer um espectro de nove riscas brilhantes, muito intensas, sobre um fundo cinza-claro, o que o faz soltar um grito de contentamento [3]. Pela posição das riscas, identifica-as - à excepção de uma - com riscas de Fraunhofer, respectivamente B, D, E, b, F, duas riscas de G [13] (estas atribuições são imprecisas; B era por exemplo C). Rayet dirigiu em seguida o seu telescópio para outro grupo de protuberâncias, em forma de cadeia montanhosa, obtendo um espectro semelhante ao primeiro, com excepção de uma risca violeta que desta feita não era visível. Concluiu assim que as protuberâncias eram jactos de matéria gasosa incandescente, "chamas de um fenómeno químico de extrema potência", e de composição química algo variável. A expedição do Observatório levantou ferro de Wha-Tonne logo a 19 de Agosto, abandonando o mais depressa possível a costa insalubre. Apesar disso, vários expedicionários viriam a padecer por longos meses de febres intensas contraídas em terra. Rama IV

ECLIPSE DE SOLEIL DU 18 AOUT. — Trois grandes expéditions scientifiques avaient été envoyées dans l'Inde pour y observer cette éclipse, la plus importante du siècle. L'expédition anglaise, la plus nombreuse des trois, organisée par la Société royale de Londres et l'observatoire de Greenwich, a envoyé des dépêches télégraphiques, cette semaine, à l'Association britannique pour l'avancement des sciences, en ce moment en session à Norwich. Il paraît que quelques nuages ont gêné ses observations. Des deux expéditions françaises, celle qui a été organisée par l'observatoire de Paris n'a pas encore donné de ses nouvelles. On a reçu, au contraire, une dépêche télégraphique de M. Janssens, chargé par le bureau des longitudes d'observations d'analyse spectrale et de physique du globe. M. Janssens annonce que le spectre des protuberances rosacées lui a présenté des particularités inattendues, et démontre la nature gazeuse de ces corps.

Figura 5 - Notícia publicada na "Revue des Cours Scientifiques"

faleceria em Outubro desse ano, também em consequência de doença contraída em Wha-Tonne.

BALANÇO CIENTÍFICO

As observações espectroscópicas efectuadas permitiam concluir da natureza gasosa das protuberâncias, o que concordava com a ausência de polarização. As riscas observadas mostravam além disso que o hidrogénio era um dos constituintes principais, se não o principal, das mesmas [12,15]. A comparação das protuberâncias observadas em diversos pontos da faixa de totalidade, e portanto em diversos instantes, fornecia além disso as primeiras informações sobre a sua evolução temporal [16]. O outro grande resultado das missões, embora negativo, era também importante. Ninguém pretendia ter visto o espectro de emissão devido à "camada inversora" de Kirchhoff, o que implicava uma espessura muito pequena ou nula para esta [2].⁴ Muitas noções sobre a estrutura e dinâmica do Sol mantinham-se contudo incorrectas, e só muito mais tarde viriam a ser rectificadas. Por exemplo, persistia a ideia de o espectro contínuo de emissão da fotosfera ser devido à combustão de hidrogénio (molecular⁵) em condições de pressão elevada.

O Sol e as outras estrelas seriam assim fornalhas imensas, hipótese que vinha aliás já do Século XVIII (o século do oxigénio e das combustões) e está expressivamente cristalizada na constelação austral a que o astrónomo La Caille (1713-1762), aliás professor de Lavoisier, chamou *Fornax Chemica*.

UM DESENVOLVIMENTO INESPERADO

Não era satisfatório poder observar as protuberâncias apenas durante os breves momentos de obscuridade de um



Figura 6 - Medalha cunhada pela Academia das Ciências de Paris para comemorar o novo processo de estudo das protuberâncias, desenvolvido independentemente por Janssen e Lockyer. Pierre César Jules Janssen principiou por trabalhar num banco, tendo-se doutorado em 1860. Dirigiu várias expedições científicas para o estudo do magnetismo terrestre (Perú 1857, Açores 1867), da Física do Sol e da atmosfera (Itália 1861, Índia 1868). Fundou os observatórios de Meudon (onde tem uma estátua) e do Monte Branco. Sir Joseph Norman Lockyer começou por ser funcionário do British War Office, dedicando-se à astronomia como amador. Fundou em 1869 a revista *Nature*. Dirigiu os observatórios de South Kensington e Sidmouth. Organizou oito expedições para a observação de eclipses. Foi autor de várias obras sobre espectroscopia e astrofísica, bem como de um livro sobre golfe.

eclipse total. Por um lado, estes são raros (dois por ano, no máximo) e apenas observáveis em faixas do globo nem sempre favoráveis. Por outro, o estudo da dinâmica das protuberâncias e restante atmosfera solar precisava de maiores tempos de estudo continuado. Na noite de 18 para 19 de Agosto, Janssen não adormece, pensando sem cessar no modo de ultrapassar a dificuldade. E encontra a solução. Bastava usar uma fenda suficientemente estreita, disposta tangencialmen-

te ao disco solar, para apenas captar a radiação devida à protuberância, isolando-a do fundo intenso fotosférico. Janssen está a pé desde as três da manhã de 19 de Agosto, impaciente por testar a sua técnica. Pelas 10 horas, assim que o Sol irrompe por entre a neblina matinal, reencontra imediatamente as riscas brilhantes que entrevira fugazmente na véspera. Que alegria não terá sentido!

Depois, realiza até 4 de Setembro observações quase ininterruptas das protuberâncias, como se de um eclipse de 17 dias se tratasse.

Entretanto, em Inglaterra, o astrónomo Joseph Lockyer (1836-1920) vinha fazendo desde há quase dois anos e meio tentativas semelhantes mas sempre sem êxito o que levava a concluir (e publicar) não serem as protuberâncias gasosas. Os relatos do eclipse recebidos na Europa, em especial os de Rayet, Herschel e Tennant, mostraram-lhe que estava errado. Atribuía agora os seus próprios insucessos ao pouco poder dispersivo do espectroscópio que usara. Um novo aparelho, construído expressamente para a observação do eclipse mas cuja construção e uso se tinham atrasado devido a doenças graves, tanto sua como do fabricante, ficou finalmente pronto e testado em 20 Outubro de 1868. Ainda na manhã desse mesmo dia, no seu observatório particular, situado no jardim da sua casa em Wimbledon, Lockyer consegue ver o espectro de emissão de uma protuberância. Este apresenta três riscas: C e F, devidas ao hidrogénio, e uma terceira, próxima de D

mas não coincidente com esta, "diferindo de 8 ou 9 graus da escala de Kirchhoff" [17]. No mesmo dia em que o relato de Lockyer chega à Academia das Ciências de Paris, e com um intervalo de poucos minutos, é recebido o primeiro relato de Janssen, datado de 19 de Setembro, em que esta apresenta o mesmo método de observação das protuberâncias no Sol normal [18].

O relatório completo de Janssen [19], datado de 3 de Outubro, só chegará em 1869 à Academia, em consequência de um arrelizador erro postal.

Põe-se desde logo a questão da prioridade da descoberta: Lockyer ou Janssen? Embora a ideia tivesse sido avançada primeiro por Lockyer, os resultados negativos obtidos tinham-no feito chegar a conclusões incorrectas, e só as observações alheias feitas durante o eclipse o haviam levado de novo ao bom caminho. Além disso, a primeira observação de Janssen (19 de Agosto) era sem dúvida anterior à de Lockyer (20 de Outubro).

A Academia das Ciências de Paris, pela voz de H. Faye [20], concluiu pois que "em vez de dividir os méritos da descoberta, enfraquecendo-os, é preferível atribuir indistintamente a sua honra aos dois homens de ciência que, separados por vários milhares de léguas de distância, tiveram a felicidade de perscrutar o intangível e o invisível pelo talvez mais espantoso meio de observação jamais concebido pelo engenho humano".

Por esta descoberta, e entre outras distinções, Janssen e Lockyer receberam em conjunto a medalha de ouro da Academia das Ciências de Paris. (Figura 6; ver Destaque III).

Outros astrónomos haviam imaginado um método alternativo de observação das protuberâncias e cromosfera com um Sol não eclipsado. Pouco depois dos resultados de Janssen e Lockyer serem conhecidos, Huggins recorda que propusera e tentara já o uso de um filtro monocromático. Como a emissão das protuberâncias se concentrava em algumas riscas intensas, deveria ser possível observá-las anulando o contínuo fotosférico por meio de um filtro que apenas deixasse passar radiação com o comprimento de onda de uma das riscas. Também Herschel tivera a mesma ideia após observar as protuberâncias. Mas as dificuldades de construção de um tal filtro só viriam a ser ultrapassadas por Lyot em 1933.



III. Um medalhão alusivo

Existe nas lojas da Imprensa Nacional-Casa da Moeda (INCM) um quadro circular em cobre, de 23 cm de diâme-

tro, representando Apolo e o seu carro em baixo-relevo. O filho de Zeus aponta um disco solar onde são visíveis protuberâncias tais como no-las descrevem os observadores do eclipse de 18 de Agosto de 1868. Encimam os dizeres: *Analyse des Protuberances Solaires. 18 Aout 1868.*

Não pudémos estabelecer a origem e motivação primitivas da Casa da Moeda para a feitura deste "galvano" (chapa obtida por galvanoplastia). A matriz existente na CM é no entanto bastante antiga. A presente série, com 2 ou 3 anos, obedeceu a critérios puramente estéticos.

O "galvano" é uma reprodução, ampliada, de uma das faces da medalha que a Academia das Ciências de Paris mandou cunhar em comemoração do feito de Janssen e Lockyer (Figura 6).

UM NOVO ELEMENTO?

A importância da pequena diferença de comprimentos de onda (menos de 2 nm) entre a risca amarela/laranja solitária das protuberâncias e a risca D dupla do sódio não passou despercebida. Assinalada desde 20 de Outubro por Lockyer, a divergência foi rapidamente confirmada e quantificada por vários astrónomos, entre eles o Padre Secchi, S.J., do Collegio Romano [21,22] e Rayet [23]. Também Janssen, ainda na Índia, em Nota datada de 19 de Dezembro [24], refere, talvez forçadamente, ter constatado o mesmo desde o dia do eclipse, mas não dando sequer o comprimento de onda da nova risca, ao contrário de Secchi e Rayet (588.0 nm e 587.4 nm, respectivamente, bastante próximos do valor correcto, 587.6 nm; para comparação, note-se que o duplete do sódio fica a 589.0 nm (D_2) e 589.6 nm (D_1)⁶).

Rayet é aliás o primeiro a aventar a hipótese de a nova risca amarela, dita D_3 , ser devida a um gás desconhecido [14,23]. Frankland e Lockyer, por seu lado, inclinam-se mais para que ela seja devida ao hidrogénio [24]. Ao mesmo tempo, Lockyer avança um nome para a substância produtora da risca, e que ele tenta sem sucesso reproduzir em laboratório com hidrogénio: "for laboratory use, the substance which gave rise to the line in the yellow, I named helium." [25] (ver Destaque IV). Lockyer verá depois o hélio como uma forma de hidrogénio estável a altas temperaturas [25,26]. Com efeito, foi proponente e defensor acérrimo da teoria da evolução inorgânica, segundo a qual os elementos se dissociariam em formas cada vez mais simples, à medida que a temperatura se elevasse. Hoje reconhecemos nessas formas sucessivos estados de ionização de vários elementos.

A existência de uma nova substância, desconhecida na Terra, fora proposta e recebida com reserva. As pressões e temperaturas no Sol poderiam ser tais que a risca pertencesse a um elemento conhecido, tal como o hidrogénio. A situação era de alguma incerteza, como o reconhecia W. Thomson (mais tarde Lord Kelvin) em 1871, ao afirmar, em sessão da British Association "Frankland and Lockyer find the yellow (*sic*) prominences to give a very decided bright line not far from D, but hitherto not identified with any terrestrial flame. It seems to indicate a new substance, which they propose to call Helium" [27].

O eco da descoberta junto dos quí-

micos foi quase nulo. Num tratado de Química de 1889 [28] refere-se o espectro das protuberâncias para se dizer que estas apresentam "riscas brilhantes coincidentes com as do hidrogénio, com uma das do magnésio e *aproximadamente coincidentes* com as do sódio", sem qualquer menção ao hipotético hélio. Este ainda teria de esperar até 1895 para se ver reconhecido como novo elemento, em consequência do seu isolamento na Terra. Até lá não passaria de mais um dos elementos fantasma em que a Análise Espectral foi fértil (Quadro II).

AGRADECIMENTOS

À Dr^a Alfredina do Campo, pelo auxílio prestado nas pesquisas bibliográficas realizadas no Observatório da Ajuda, e ao Dr. John Hearnshaw (Universidade de Canterbury, Christchurch, Nova Zelândia), por informações sobre N. Pogson.

Quadro II. Alguns elementos inexistentes sugeridos pela Análise Espectral

NOME PROPOSTO	RISCAS CARACTERÍSTICAS *	PRIMEIRA OBSERVAÇÃO *	ATRIBUIÇÃO CORRECTA
HÉLIO	447.1; 471.3; 587.6 (D_3); 706.5; 1083.0	Protuberâncias solares (Herschel, Tennant, Janssen, Rayet, Haig, Pogson, 1868)	hélio no estado tripleto (ortohélio)
ASTÉRIO	492.2; 501.6; 667.8 °	hélio gasoso (Runge e Paschen, Lockyer, 1895)	hélio no estado singuleto (parahélio)
PROTOHIDROGÉNIO	454.2; 541.2; 1012.4 ° (série de Pickering)	estrela ζ Puppis (Pickering, 1896)	hélio ionizado He ⁺ (Bohr, 1913)
NEBÚLIO	372.8; 495.9 (N_1); 500.7 (N_2)	várias nebulosas gasosas (Huggins 1864, 1882)	oxigénio atómico ionizado O ⁺ (372.8 nm) O ²⁺ (N_1 e N_2) (Bowen, 1927)
CORÓNIO	530.3 *	coroa solar (Pogson, Rayet, 1868)	ferro ionizado, Fe ¹²⁺ (Edlén, 1942)
GEOCORÓNIO	557.7	auroras polares	oxigénio atómico (transição proibida) (McLeman e Shrum, 1924)

* comprimentos de onda no ar, em nm.

° Os primeiros observadores nem sempre foram os proponentes da existência do novo elemento.

° Riscas observadas previamente por Lockyer na nebulosa do Orion, em 1890.

° Algumas riscas do He⁺ foram observadas anteriormente, nomeadamente 468.6 nm (que não pertence à série de Pickering) numa estrela da constelação do Cisne por Wolf e Rayet em 1867.

° Na região visível, observam-se muitas outras riscas menos intensas, devidas a outros elementos ionizados, ou ao ferro em outros estados de ionização, e.g. Fe⁹⁺ (637.4 nm), Ca¹²⁺ (408.6 nm).

NOTAS

¹ Autor do *Canon dos Eclipses* (1887), monumental obra que reúne parâmetros e mapas referentes a 8000 eclipses solares e 5200 eclipses lunares, cobrindo o período de 1207 a.C. a 2161 d.C. Actualmente existem programas para computadores pessoais (e.g. ECLIPSIM) que realizam os mesmos cálculos laboriosos, mas com maior rigor e em frações de segundo.

² Notabilizou-se pelos seus estudos do efeito de Doppler em espectros estelares. Deve-se-lhe o conhecido exemplo da variação de frequência do silvo da locomotiva ao passar por um observador imóvel.

³ Retratado no conhecido filme "O Rei e Eu" (*The King and I*, 1956).

⁴ O espectro relâmpago (assim chamado por

Quadro I. Elementos descobertos por análise espectral

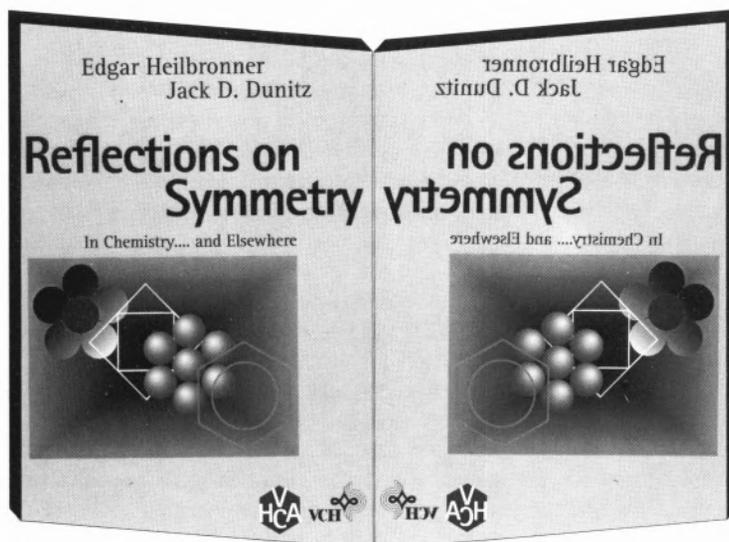
NOME	SIGNIFICADO	SÍMBOLO	DATA	DESCOBRIDOR
CÉSIO	L. caesius, azul celeste (das duas riscas azuis)	Cs	1860	Bunsen e Kirchhoff
RUBÍDIO	L. rubidius, vermelho (das duas riscas vermelhas)	Rb	1861	Bunsen e Kirchhoff
TÁLIO	G. thalios, talo (da risca verde)	Tl	1861	Crookes e Lamy
ÍNDIO	indigo, azul (da risca azul)	In	1863	Reich e Richter
HÉLIO	G. helios, Sol (observado no Sol)	He	1868	Lockyer
GÁLIO	L. Gallia, Gália (França)	Ga	1875	Boisbaudran
HÓLMIO	L. Holmia, Estocolmo	Ho	1878	Delafontaine e Soret
SAMÁRIO	samarskite, mineral	Sm	1879	Boisbaudran
DISPRÓDIO	G. dysprositos, difícil de obter	Dy	1886	Boisbaudran
EURÓPIO	de Europa	Eu	1890 1901	Boisbaudran Demarçay

durar alguns segundos) viria a ser observado em 1870 pelo astrónomo americano Young, durante outro eclipse total. O relato de Haig contém contudo uma descrição que se adapta a este, e poderá ter sido essa de facto a primeira observação. Diz Haig que imediatamente antes de o Sol reaparecer abaixo das protuberâncias que observa, o espectro passou a apresentar várias riscas, destacando-se uma verde e uma azul, com cerca de um quarto de altura das riscas das protuberâncias e correspondendo portanto a uma camada relativamente fina.

⁵ Note-se que se desconhecia à época que o espectro de riscas do hidrogénio era devido ao hidrogénio atómico. A própria realidade de átomos e moléculas não estava ainda bem estabelecida.

⁶ Comprimentos de onda no ar. Os valores de Secchi e de Rayet foram recalculados a partir da posição dada em relação a D.

Reflections on Symmetry



1992. Ca 168 pages with ca 118 figures.
Hardcover. DM 58.00.
ISBN 3-527-28488-5 (VCH, Weinheim)

What do Schrödinger's wave functions, Escher's intricate tiling patterns and chemistry's latest marvel, buckminsterfullerene, have in common?

This stunning book, written by two world-famous scientists, introduces the reader to one of nature's most fundamental, and ubiquitous, phenomena: Symmetry.

Enormous in scope, this scientific tour-de-force covers topics as diverse as quantum mechanics, stereochemistry, Penrose tilings and Raphael's

Madonna. The authors connect these apparently unrelated fields in a completely non-mathematical fashion, which should appeal to the general and specialist reader alike.

Lucidly written and beautifully illustrated, this book provides an eminently readable discussion of the omnipresent concept of symmetry, its application in all branches of science, and its perception in nature, art and elsewhere.

Hoffmann, R.

Solids and Surfaces

A Chemist's View of Bonding in
Extended Structures

1989. 142 pages with 177 figures and
4 tables.

Hardcover. DM 48.00.
ISBN 3-527-26905-3 (VCH, New York)

To order please contact your bookseller or:

VCH, P.O. Box 10 11 61, D-6940 Weinheim, Fax 06201- 606184

VCH, Hardstrasse 10, P.O. Box, CH-4020 Basel

VCH, 8 Wellington Court, Cambridge CB1 1HZ, UK

VCH, 220 East 23rd Street, New York, NY 10010-4606, USA (toll free: 1-800-367-8249)



Por trás do artigo de Química*

R. HOFFMANN*

Se abrir um número dum revista moderna de Química, como a conceituada *Angewandte Chemie* alemã, [1] ou o *Journal of the American Chemical Society*, o que vê? Preciosidades sobre preciosidades: relatórios de novas descobertas, moléculas maravilhosas, infatigáveis ontem — feitas hoje, reproduzivelmente, com facilidade. O químico lê acerca das incríveis propriedades dos novos supercondutores de alta temperatura, ferromagnetos orgânicos, solventes supercríticos. Novas técnicas de medida, rapidamente equipadas com acrónimos — EXAFS, INEPT, COCONOESY — permitem-lhe decifrar mais expeditamente a estrutura daquilo que fez. A informação simplesmente flui. Não interessa se é em alemão, se é em inglês. É Química — comunicada, excitante, viva.

Tomemos, contudo, outra perspectiva. Um humanista, observador inteligente e perceptivo, que dominou *Shakespeare*, *Puchkine*, *Joyce* e *Paul Celan*, vira-se para as páginas da mesma revista. Estou a pensar numa pessoa que está interessada no que se escreve e também em como e porque se escreve. O meu observador repara que a revista tem artigos pequenos, de uma a dez páginas de tamanho. Repara na abundância de referências, escolhos familiares para os eruditos literários, mas talvez com maior densidade (número de referências por linha de texto) do que nos textos eruditos das letras. Vê uma grande proporção da página impressa dedicada aos desenhos. Muitas vezes estes parecem ser imagens de moléculas, no entanto são curiosamente icónicos, faltando as designações completas dos átomos. As representações do químico não são projecções isométricas, nem desenhos com perspectiva real, e, contudo, são parcialmente tridimensionais. O meu observador lê o texto, curioso, talvez ignorando o calão, talvez penetrando nele com a ajuda dum amigo químico. Observa uma forma ritual. As primeiras frases começam muitas vezes: "A estrutura ligação e espectroscopia de moléculas do tipo X têm sido objecto de imenso interesse.^{a-z}" Há um uso generalizado da terceira pessoa e da passiva. Encontra poucas motivações pessoais expressas abertamente e poucas descrições do desenvolvimento histórico. Aqui e ali, no

meio da linguagem neutra, vislumbra pretensões declaradas de realizações — "um novo metabolito", "a primeira síntese", "uma estratégia geral", "cálculos independentes de parâmetros". Ao estudar muitos artigos, acha uma desoladora semelhança entre eles. No entanto, como é fácil de observar em certos artigos, também encontra estilo — uma maneira distinta de olhar o universo químico, ligando ciência, escrita e grafismo.

Eu quero olhar, agora sem me esconder atrás deste observador, para a linguagem da minha ciência, tal como é expressa no veículo escrito essencial, o artigo na revista de Química. Vou argumentar que há muito mais num artigo do que transparece à primeira vista; que o que há é uma espécie de luta dialéctica entre o que o químico acha que deve ser dito (o paradigma, a norma) e aquilo que ele ou ela deve dizer para convencer os outros dos seus argumentos e realizações. Esta luta confere uma enorme dose de tensão suprimida ao artigo de aspecto mais inocente. Revelar essa tensão, afirmo eu, não é de modo nenhum um acto de fraqueza ou irracionalidade, mas sim o reconhecimento do humanismo profundo do acto criativo em ciência.

O ARTIGO CIENTÍFICO: UMA BREVE HISTÓRIA

Já havia Química antes das revistas de Química. Vinha descrita em livros, em panfletos, em cartas para os secretários das sociedades científicas. Estas sociedades, como, por exemplo, a Royal Society de Londres, fundada em 1662, tiveram um papel crítico na disseminação do conhecimento científico. As suas publicações periódicas ajudaram a desenvolver a combinação especial de medidas cuidadosas e formulação matemática que conferiram forma à nova e próspera ciência do tempo[2].

Os artigos científicos desse tempo são uma mistura curiosa de observação pessoal e discussão, com motivação, método, e muitas vezes história na primeira pessoa. *Shapin*, [3a] *Dear* [3b] e *Holmes* [3c] deram argumentos convincentes para o início da codificação do estilo do artigo científico em França e Inglaterra, no Século XVII. Acho que a forma do artigo de Química se tornou

rígida por volta de 1830 ou 1840 e que isso aconteceu na Alemanha. A luta decisiva foi entre os fundadores da moderna Química alemã — pessoas como *Justus von Liebig* — e os *Naturphilosophen*. Neste período em especial, o último grupo teria sido representado pela escola de *Goethe*, mas manifestava-se noutros pontos da Europa, mesmo mais cedo, no Século XVIII. Os Filósofos Naturais tinham noções bem formadas, teorias globais, de como a Natureza se devia comportar, mas não se dignavam sujar as mãos para descobrir como a Natureza na verdade funcionava. Ou tentavam encaixar a Natureza no seu modelo filosófico ou poético, não se importando com o que diziam os nossos sentidos ou os seus prolongamentos, os instrumentos. O artigo científico evoluiu no Século XIX de modo a opôr-se à influência perniciosa dos Filósofos Naturais. A descrição ideal dum investigação científica deveria ocupar-se dos factos (muitas vezes designados implícita ou explicitamente como a verdade; voltaremos a isto mais à frente). Seria preciso acreditar nos factos, independentemente da identidade da pessoa que os apresentasse. Resultou disso que deveriam ser apresentados sem qualquer emoção (portanto na terceira pessoa) e sem julgamentos prévios de estrutura ou casualidade (daí a voz passiva, sem agente).

Os frutos deste modelo tipo reportagem foram imensos. A ênfase nos factos experimentais evidenciava o reproduzível. A concisão da língua alemã parecia a ideal para o paradigma em desenvolvimento. Criaram-se químicos especializados. O desenvolvimento da indústria química de corantes, que teve lugar posteriormente em Inglaterra e na Alemanha, é uma manifestação particularmente bem estudada da organização da nova química.

O artigo de Química adquiriu neste período uma forma canónica ou ritual. Na Figura 1, reproduzo parte dum artigo típico desse período [4,5]. Reparem que já aparece a maior parte das características do artigo moderno — referências, parte experimental, discussão, diagramas. Só falta o agradecimento à *Deutsche Forschungsgemeinschaft* ou à *National Science Foundation*.

211. Pr. Goldmann: Ueber Derivate des Anthranols.

(Vorgetragen vom Hrn. Professor Liebermann.)

In einer früheren Mittheilung¹⁾ habe ich über die Einwirkung von Brom auf Anthranol berichtet und ein dabei entstehendes Dibromsubstitutionsproduct als analog dem Anthrachinondichlorid von Thörner und Zincke bezeichnet. Die Bildung des Anthrachinondichlorides war hiernach bei der Einwirkung von Chlor auf Anthranol zu erwarten.



In eine kalte concentrirte Lösung von Anthranol in Chloroform wurde während etwa 20 Minuten trockenes Chlorgas geleitet, wobei die Lösung auf Zimmertemperatur erhalten wurde. Nach beendeter Reaction, bei der reichliche Chlorwasserstoffentwicklung stattfand, wurde das Chloroform auf dem Wasserbade verjagt, der Rückstand mit heissem Ligroin ausgezogen und das in Lösung gegangene Product aus einer heissen Mischung von Benzol und Ligroin umkrystallisirt.

Die Substanz wird so in Form von wasserklaren dünnen Prismen erhalten. Dieselben schmelzen bei 132–134°.

Die Verbindung ist in Benzol, Schwefelkohlenstoff, Chloroform sehr leicht, in kaltem Ligroin oder Aether ziemlich schwer löslich. Aus der Schwefelkohlenstofflösung erhält man die Substanz beim Verdunsten in schönen wasserklaren Krystallen.

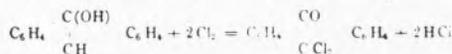
	Gefunden	Ber. für $C_{14}H_8OCl_2$
C	64,62	64,12 pCt.
H	3,25	3,05
Cl	— 26,96	26,72

Durch Kochen mit Eisessig oder Alkohol wird die Verbindung vollständig in Anthrachinon übergeführt. Die Chloratome müssen daher in der Mittelkohlenstoffgruppe sich befinden. Die Verbindung ist hiernach nach ihren Eigenschaften mit dem Anthrachinondichlorid, welches Thörner und Zincke bei der Einwirkung von Chlor auf Anthrachinon erhielten, identisch.

1) Diese Ber. p. XX, 2166.

2) Diese Ber. p. X, 1180.

Aus dem Anthranol entsteht sie nach der Gleichung:



Hr. Privatdozent Dr. A. Fock hatte die Güte, mir über die Krystallform des aus Schwefelkohlenstoff auskrystallisirten Anthrachinondichlorides Folgendes mitzutheilen:

Die Krystalle sind monosymmetrisch:

$$a : b : c = 0,7973 : 1 : 0,6262.$$

$$\beta = 72^\circ 48'.$$

Beobachtete Formen:

$$m = \infty P(110), c = o P(001), p = -P(111).$$

Die Krystalle bilden schwach gelblich gefärbte dünne Prismen, die Basis tritt nur an einzelnen Individuen und zwar ganz untergeordnet auf.

	Beob.	Berechnet
m : m	= 110 : 110	= 74° 36' —
m : c	= 110 : 001	= 76° 24' —
p : c	= 111 : 001	= 37° 54' —
p : p	= 111 : 111	= 45° 30' 45° 2'
p : m	= 111 : 110	= 38° 38' 38° 30'
p : m	= 111 : 110	= — 71° 25'

Spaltbarkeit nicht beobachtet.

Auch das analoge Anthrachinondibromid hat Hr. Dr. Fock zu messen die Güte gehabt, wobei er folgende Resultate erhielt:

Die Krystalle sind monosymmetrisch:

$$a : b : c = 1,5009 : 1 : 1,4708.$$

$$\beta = 70^\circ 43'.$$

Beobachtete Formen:

$$c = o P(001), p = -P(111), o = +P(111).$$

$$q = \frac{1}{2} P^x(012), w = +2 P^z(121).$$

Schwach gelblich gefärbte Krystalle von 1–4 mm Größe, in recht verschiedenartiger Ausbildung. Meistens herrschen die Flächen der vorderen Pyramide p und der Basis vor, während die übrigen nur ganz untergeordnet ausgebildet sind. Bisweilen sind die Flächen der Pyramide w grosser ausgebildet und zwar theilweise nur einseitig, sodass die Krystalle eine ganz unregelmäßige Ausbildung erhalten.

Figura 1. As duas primeiras páginas dum artigo típico de 1888 [4].

Na Figura 2, um artigo contemporâneo, aproximamo-nos do presente. Esta contribuição em especial, bastante importante, de O. J. Scherer e T. Brück [6], descreve um sistema tipo ferroceno em que um anel ciclopentadienilo foi substituído por P_5 . O trabalho é original e significativo, mas eu quero concentrar-me mais no modo de apresentação do que no conteúdo. Em que é que este artigo difere do outro publicado há um século? A língua dominante mudou para inglês por razões geopolíticas [7]. Contudo, não me parece que haja muita mudança na construção e no tom do artigo. Claro que se comunicam coisas novas, maravilhosas. Medidas que levaram uma vida a fazer, demoram agora um milissegundo. Moléculas inimagináveis há um século são feitas facilmente e revelam a sua identidade, num relance, a conhecedores como nós. E é tudo comunicado numa revista mais espampa-

nante, impressa com certeza em papel de pior qualidade, com melhores desenhos e impressão via computador, mas essencialmente na mesma forma. É melhor, é pior?

Bom, eu acho que é ambas as coisas. O sistema de transmissão de conhecimento através do artigo em revistas periódicas funcionou espantosamente bem durante dois séculos ou mais. Mas acho que há perigos reais (a que voltarei) implícitos nesta forma canónica actual. A minha principal preocupação é o que se passa ao escrever e ler um artigo científico, que é muito mais do que uma simples comunicação de factos. Para preparar a discussão do artigo científico, tenho que começar por dizer algo sobre o que eu penso que é a Ciência e a Química em particular.

UMA VISÃO PESSOAL DA QUÍMICA

Só a minha e de mais ninguém, e os outros não-de-vê-la de modo diferente [8]:

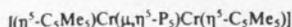
1. A Ciência é a aquisição de conhecimentos sobre o mundo.

Este sentido é claro na etimologia da palavra inglesa ou no alemão *Wissenschaft* ou *Naturwissenschaft*. Reparem que "verdade" não entra explicitamente nessa etimologia. Obviamente, a reprodutibilidade, a verificabilidade, a confiança, que são essenciais no esforço científico, dependem de medidas *honestas*. Os cientistas gostariam de pensar que adquirem a verdade (de valor ético e moral) e não apenas o conhecimento (completamente neutro; lembre-se a árvore do conhecimento do bem e do mal no Génesis). Mas gostava de chamar a atenção dos meus colegas para o perigo de fornecer ao mundo em geral uma imagem dos cientistas como seres que procuram a verdade, em vez do conhecimento de confiança [9]. Isso faz de nós padres, com as consequências inerentes. Suspeito que muito do interesse público nos casos raros de fraude em ciência tem a ver com o interesse malicioso do mundo em geral pelas falhas morais de

$[(\eta^5\text{-P}_3)\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)]$,
 a Pentaphosphaferrocene Derivative**

By Otto J. Scherer* and Thomas Brück

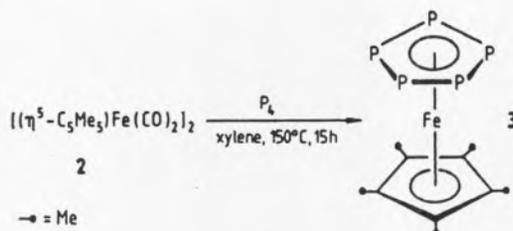
After having demonstrated that *cyclo-P*₃ could be stabilized as bridging ligand in the mixed-valence triple-decker complex **1**,^[17] we then attempted to realize the classical



1

sandwich coordination of this ligand (*cyclo-P*₃[⊖] as 6π electron donor). Success was achieved upon cothermolysis of **2** with white phosphorus.

Pentamethylpentaphosphaferrocene **3** forms, sublimable, green crystals which can be handled in the presence of air and which begin to melt (with partial sublimation and slight decomposition) at 270°C when heated in a sealed tube. **3** is very soluble in dichloromethane, readily soluble in benzene and toluene, and moderately soluble in pentane.



In the ¹H-NMR spectrum (200 MHz, 293 K, C₆D₆, TMS int.) of **3** a sharp singlet is observed at δ = 1.08 which is shifted 0.6 ppm upfield compared to that of decamethylferrocene $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2\text{Fe}]$ **4**.^[13] In comparison to the ¹³C[¹H]-NMR signals of **4**,^[2,3] those of **3**^[2] are shifted slightly downfield. The ³¹P[¹H]-NMR signal shows a continuous downfield shift within the series triple-decker **1** (δ = -290.5^[17]), monophosphaferrocene $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{Fe}(\eta^5\text{-PC}_4\text{H}_4)]$ **5** (δ = -67.5^[4]), **3** (81.01 MHz, C₆D₆, 85% H₃PO₄ ext., δ = 153.0 (s)), and Li(P₃) (δ = 470^[5]). In the mass spec-

[*] Prof. Dr. O. J. Scherer, Dipl.-Chem. T. Brück
 Fachbereich Chemie der Universität
 Erwin-Schrödinger-Strasse, D-6750 Kaiserslautern (FRG)

[**] This work was supported by the Fonds der Chemischen Industrie.

trum,^[2] the most intense peak is the molecular peak of **3**, followed by the peak for *M*[⊖]-P₂. So far, all attempts to prepare a single crystal suitable enough for an X-ray structure analysis have failed, both by sublimation as well as recrystallization. *cyclo-P*₃[⊖] is probably formed from P₃[⊖] and P₂.^[6]

Experimental

A mixture of **2** [7] (980 mg, 2.3 mmol) and P₄ (1500 mg, 12.1 mmol) in xylene (80 mL) was stirred under reflux for 15 h and the insoluble material removed by filtration on a D3 frit and extracted three times with 80 mL each of CH₂Cl₂ (393 mg of residue after drying under high vacuum). The solvent was removed from the combined extracts under oil-pump vacuum. After three extractions with 50 mL each of pentane there remained 726 mg of a brown solid whose composition could not be unequivocally established. After removal of the solvent from the green extracts (oil-pump vacuum), the residue remaining behind was sublimed. At 60°C/0.01 torr, excess phosphorus was removed; between 90° and 110°C, green needles sublimed on the wall of the glass vessel. Recrystallization from pentane furnished 175 mg of **3** (yield 11%). Correct elemental analysis.

Received: October 20, 1986;
 supplemented: November 7, 1986 [Z 1957 1E]
 German version: *Angew. Chem.* 99 (1987) 59

- [1] O. J. Scherer, J. Schwalb, G. Wolmershäuser, W. Kaim, R. Gross, *Angew. Chem.* 98 (1986) 349; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 25 (1986) 363.
- [2] ³¹C[¹H]-NMR (50.28 MHz, C₆D₆, TMS intern) **3**: δ = 90.6 (s; C₅Me₅), 10.6 (s; CH₃); **4**: δ = 78.5 (s; C₅Me₅), 9.8 (s; CH₃). EI-MS (70 eV) of **3**: *m/z* 346 (*M*[⊖], *I*_{rel} = 100%), 284 (*M*[⊖]-P₂, 91%), P₄ (19.8%), P₃ (7.9%), P₂ (53%), P (7.8%) and further, weak intensity lines.
- [3] Cf.: J. L. Robbins, N. Edelstein, B. Spencer, J. C. Smart, *J. Am. Chem. Soc.* 104 (1982) 1882.
- [4] F. Mathey, *Struct. Bonding (Berlin)* 55 (1983) 153.
- [5] M. Baudler, *Phosphorus Sulfur*, in press; M. Baudler, D. Düster, D. Ouzounis, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, in press.
- [6] Cf. also the theoretical studies on N₃[⊖] and its complex stabilization. M. T. Nguyen, M. Sana, G. Leroy, J. Elguéro, *Can. J. Chem.* 61 (1983) 1435; M. T. Nguyen, M. A. McGinn, A. F. Hegarty, J. Elguéro, *Polyhedron* 4 (1985) 1721.
- [7] D. Catheline, D. Astruc, *Organometallics* 3 (1984) 1094, and references cited therein.

Figura 2. Um artigo contemporâneo [6].

sacerdotes e ministros. Acho que nós adquirimos conhecimento e fazemo-lo do modo mais verdadeiro que podemos.

2. A Ciência é em parte descoberta, em parte criação

Uso o termo descoberta no sentido de revelar algumas leis da natureza, talvez obscurecidas, e o termo criação no sentido de fazer coisas novas. Quando descrevem o seu trabalho, os cientistas, na sua maior parte, realçam a metáfora da descoberta, ao passo que a maior

parte dos artistas põe a ênfase na da criação. Bem, eu acho que muito do que fazemos em ciência é criação, especialmente em Química. A síntese de moléculas ainda não existentes na Terra é uma prova clara disto. A síntese é uma maravilhosa acumulação de descoberta e criação que aproxima a Química das artes — e da engenharia[10].

3. A Ciência é feita por seres humanos e pelos seus instrumentos

Isto quer dizer que é feita por seres humanos falíveis. Claro que as forças que nos levam a adquirir conhecimento são a curiosidade e o altruí-

mo, motivos racionais. Mas o acto de criar tem igualmente raízes no irracional, nas águas sujas e escuras da mente, onde medos, poder, sexo, traumas infantis nadam com todos os seus movimentos misteriosos e escondidos. E instigam-nos. Na sequência do *Mozart e Salieri de Puchkine*, ou da sua reencarnação moderna na peça *Amadeus* de Peter Schaffer e no filme nela baseado: a música angelical (leia-se Química) pode ser trazida para este mundo por veículos muitos grosseiros. Não só o carácter e as motivações íntimas não interessam, como o lado "sórdido" até pode ser a força motivadora do acto criativo.

4. A Ciência avança de certo modo segundo regras

O modelo moderno do pensamento científico, associado neste século talvez ao nome de *Karl Popper*, começa com observações mensuráveis, reproduzíveis. Depois, formulam-se hipóteses ou modelos alternativos para explicar estas observações. Finalmente, com a ajuda de mais experiências ou de uma teoria de confiança, as hipóteses são examinadas, eliminadas uma a uma, até ficar apenas a que tem mais probabilidade de ser a certa. Às vezes funciona assim[11], embora seja curioso que aconteça principalmente com a ciência do dia a dia e não com a ciência que desbrava novos caminhos. Mas será que este modelo se aplica à síntese moderna duma molécula não natural, como, por exemplo, o dodecaedro, uma espantosa molécula $C_{20}H_{20}$ com a forma que o nome sugere? Ou o desenvolvimento da técnica de ressonância magnética nuclear, tão útil para um químico à procura do arranjo espacial dos átomos como para um médico à procura dum tumor no cérebro?

5. A Ciência depende da argumentação

"Argumentação" tem vários significados — pode ser tomado simplesmente como um modo de raciocínio, a constatação dum facto; a palavra pode também significar desacordo, a confrontação dos opostos. Eu diria que os dois sentidos são essenciais em ciência: raciocínio lógico e desapassionado e convicção apaixonada de que um (modelo, teoria, medida) tem razão e outro não tem. Acho que a criatividade científica tem raízes na tensão interna, dentro de uma e mesma pessoa, de saber que tem razão e que essa convicção tem que ser provada a contento dos outros. Num artigo de revista.



6. Como sistema, a Ciência funciona

Os cientistas lutam individualmente para adquirir conhecimento e são motivados na sua luta por muitas e complexas razões. Como os investigadores são humanos, estão sujeitos não só à imprecisão, mas também, por vezes, a preconceitos. Espantosamente, o erro e os preconceitos do químico como indivíduo não interessam para o progresso da Química. A Química como ciência, a actividade colectiva de meio milhão de pessoas do mundo, que são químicos, avança apesar dos erros de cada um deles. [12]. A Ciência tem imensos processos de auto-correcção: o mais importante é que, quanto mais interessante for a observação ou teoria, maior é a probabilidade de outros a repetirem para verificar. Às vezes fazem-no por razões "erradas" — na convicção de que a observação inicial devia estar errada. Não importa porque é que um químico individual repete uma síntese crítica, ou experimenta uma teoria alternativa. A Química avança.

E, contudo, é importante que um químico *tente* provar que o mecanismo proposto por outro está errado, ou tente sintetizar uma molécula em primeiro lugar, porque sem o impulso humano nada seria realizado. Esta nossa ciência é uma curiosa criação — um sistema útil de conhecimento, excitante, incrivelmente resistente, construído por pessoas imperfeitas e que depende destas imperfeições para progredir.

7. A Química é a ciência das moléculas

É preciso dizer mais? Há limites na definição, mas as moléculas, nas diatómicas, à anidrase carbónica e ao $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ são o nosso negócio. E são um grande negócio — fazem-se por ano 10^{11} quilos de ácido sulfúrico e mais quilos de amónia do que o número de seres humanos.

8. A Química não é redutível à Física

O reducionismo é algo com que nos têm acorrentado há dois séculos. Quero indicar com este termo o estabelecimento de uma hierarquia de ciências: Ciências Sociais, Biologia, Química, Física, e, por corolário, uma definição de conhecimento numa ciência como sendo a redução ao nível seguinte, mais profundo[13]. Sinto que os cientistas aceitam isto como ideologia, mas não repre-

senta a realidade do trabalho produtivo em nenhuma ciência e a ideia é perigosa. Hei-de voltar aos perigos mais tarde. O que acho que acontece, na realidade, é que há um conjunto de objectos, questões e conceitos que evolui de cada actividade dos seres humanos. Podemos-lhes chamar categorias. O conhecimento pode ser definido verticalmente, numa maneira reducionista, mas também horizontalmente, em termos das questões e dos conceitos dessa ciência. A maior parte dos conceitos úteis da Química (para o químico: aromaticidade, o conceito de grupo funcional, efeitos esteroquímicos, tensão num anel) é imprecisa. Quando se reduzem à Física, tendem a desaparecer[14]. Mas à custa deles foi e é desenvolvida uma Química maravilhosa.

O QUE ACONTECE REALMENTE NUM ARTIGO QUÍMICO

Podia prosseguir e fazer uma lista de outros pontos de vista sobre Ciência e Química, mas para mim estes são suficientes para começar uma discussão sobre o artigo químico e o que dele transparece.

Na sua aparência, o artigo pressupõe ser uma comunicação de factos, talvez uma discussão, sempre desapassionada e racional, de mecanismos alternativos e teorias, e uma escolha, mais ou menos convincente, entre eles. Ou a demonstração de uma nova técnica de medida, ou uma nova teoria. E, notavelmente, o artigo funciona. Uma parte experimental detalhada na *Angewandte Chemie* em alemão ou inglês pode ser reproduzida (de facto, a facilidade com que pode ser reproduzida é outra história [15]) por alguém com um conhecimento rudimentar de qualquer das línguas, trabalho em Okasaki ou Krasnoyarsk. Esta característica subjacente de reprodutibilidade potencial ou real é para mim a melhor prova de que a ciência é um conhecimento de confiança[16].

Mas num artigo científico há muito mais do que aquilo que os olhos vêem. Encontro isso nos temas seguintes, muitos dos quais são também descritos e analisados dum modo muito mais profundo num livro notável de *David Locke, Science as Writing*[17].

Arte

O artigo de química é uma criação artística. Deixem-se explicar o que pode

ser entendido como um exagero radical. O que é a Arte? Uma coisa para cada pessoa. Um aspecto da arte é a estética, outro o provocar uma resposta emocional. Noutra tentativa de construir uma definição ilusória dessa actividade humana que engrandece a vida, direi que a arte é a procura da essência de algum aspecto da natureza ou duma emoção por um ser humano. A arte é uma construção humana e obviamente não natural.

O que se escreve numa revista científica não é uma representação verdadeira e fiel (admitindo que tal fosse possível) do que acontece. Não é um caderno de laboratório e sabe-se bem que esse caderno, por sua vez, só é um guia parcial do que realmente se passou. É um *texto* construído, com mais ou menos (espera-se que mais) cuidado, por um homem ou uma mulher. Muitos dos obstáculos que se opuseram à síntese ou à construção do espectrómetro foram expurgados do texto. Os que restam servem o objectivo retórico (que não é mais fraco só porque é suprimido) de nos fazer pensar melhor do autor. Os obstáculos que são transpostos põem em relevo a história do sucesso.

O artigo de Química é uma construção abstracta duma actividade química, feita pelo homem. Se se tiver sorte, provoca uma emoção estética ou emocional nos seus leitores.

Há alguma razão para ter vergonha em admitir que as nossas comunicações não são espelhos perfeitos, mas sim, numa parte substancial, textos literários? Acho que não. De facto, acho que há algo requintadamente belo nos nossos textos. Estas "messages that abandon", parafraseando *Jacques Derrida*[18], na realidade deixam-nos, voam para leitores atentos em todos os países do mundo. São lidos, na sua língua original, e compreendidos; proporcionam prazer e, ao mesmo tempo, podem ser transformados em reacções químicas, em coisas novas e reais. Seria inacreditável, se não soubéssemos que acontece milhares de vezes por dia.

História

Uma das características mais citadas para distinguir a ciência das artes é o uso mais óbvio de cronologia na ciência, explicitada no uso abundante de referências. Mas é história verdadeira ou uma versão abonecada?

Um guia de estilo químico muito em voga no meu tempo admoestava: "... uma coisa a evitar é a narração exhaustiva

da cronologia do trabalho num problema. A história completa duma investigação pode incluir uma hipótese inicial errada, um indício falso, uma interpretação errada de direcções, uma circunstância fortuita; tais detalhes terão possivelmente valor como divertimento numa conferência sobre investigação, mas estão certamente deslocados num artigo formal. Um artigo deve apresentar, o mais directamente possível, o objectivo do trabalho, os resultados e as conclusões; os acontecimentos de acaso ao longo do percurso têm pouco interesse para o relatório definitivo[19]."

Sou a favor da concisão, da economia de frase. Mas os conselhos deste guia de estilo, quando seguidos, levam a autênticos crimes contra a humanidade do cientista. Para apresentar uma versão asséptica, paradigmática dum estudo químico, suprimem-se muitos dos actos realmente criativos. Entre estes estão as "circunstâncias fortuitas" — todos os elementos de "serendipity", da intuição criativa em acção[20].

Tomada de outra forma, a receita descrita acima para um bom estilo científico demonstra muito claramente que o artigo químico *não* é uma verdadeira representação do que transpirou ou foi aprendido, mas sim um texto construído.

Linguagem

Os cientistas acham que o que dizem não é influenciado pela língua em que o dizem, referindo-se não só à língua em si (alemão, francês, chinês), mas também às palavras dentro dessa língua. Acham que as palavras utilizadas, desde que bem definidas, são representações correctas duma realidade material subjacente que eles, os cientistas, descobriram ou matematizaram. Se as palavras são representações fiéis dessa realidade, elas devem ser traduzíveis sem ambiguidades para qualquer língua.

Esta posição é defensável — logo que a síntese do novo supercondutor de alta temperatura $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ foi descrita, foi reproduzida em cem laboratórios à volta do globo.

Mas a situação real é mais complexa. Vendo de outra maneira, as palavras são tudo o que temos. E as palavras que temos, em qualquer língua, são mal definidas, ambíguas. Um dicionário é um ciclo vicioso — experimentem e vejam como uma cadeia de definições se fecha rapidamente sobre si própria. Raciocínio e debate, tão essenciais para a comuni-

cação em ciência, avançam com palavras. Quanto mais controverso o argumento, mais simples e mais carregadas as palavras [21].

Como há-de um químico sair vivo disto? Talvez vendo o que alguns dos nossos colegas de linguística e crítica literária aprenderam durante o último século[22]. A palavra é um sinal, uma peça dum código. Significa qualquer coisa, claro, mas esse significado tem que ser descodificado ou interpretado pelo leitor. Se dois leitores tiverem dois mecanismos de descodificação diferentes, eles têm diferentes leituras e diferentes significados. A razão pela qual a química funciona em todo o mundo, permitindo à BASF construir uma fábrica na Alemanha ou no Brasil e esperar que funcione, é que os químicos aprenderam o mesmo conjunto de símbolos na sua educação.

Acho que isto explica, em parte, o que *Carl Friedrich von Weizsäcker* verificou num sugestivo artigo sobre "A Linguagem da Física"[23]: Se se examinar em detalhe uma conferência sobre investigação em Física (leia-se Química), vê-se que ela está cheia de frases imprecisas, incompletas, paragens, etc. O seminário é em geral feito extemporaneamente, sem notas, ao passo que os humanistas na maior parte das vezes lêem um texto palavra por palavra. A linguagem das conferências de Química ou de Física é muitas vezes imprecisa. No entanto, os químicos compreendem estas apresentações (pelo menos alguns...). A razão é que a conferência de Química invoca um código, um conjunto do conhecimento comum que eles partilham. Não é preciso acabar a frase — já toda a gente percebeu de que se tratava a meio dela.

Grafismo

A semiótica da Química é mais aparente na estrutura das moléculas que adornam quase todas as páginas de uma revista de Química, que identificam num relance um artigo como sendo de Química[24, 25]. O dado, apenas velho de um século, é que a estrutura das moléculas interessa. Não é só saber quais são os constituintes atômicos. É também como os componentes atômicos se ligam, como estão arrançados no espaço tridimensional e quão facilmente se afastam da sua posição de equilíbrio. A estrutura duma molécula, pela qual eu refiro a disposição no espaço de núcleos e electrões, tanto a estrutura estática no

equilíbrio como a sua dinâmica, determina todas as propriedades físicas, químicas e, em última análise, biológicas da molécula. É essencial para os químicos comunicarem uns aos outros a informação estrutural tridimensional. Os meios para essa comunicação são bidimensionais — uma folha de papel, um écran. Surge, portanto, imediatamente, um problema de representação.

Na verdade, o problema já lá está. O que é um modelo "ball-and-stick" de uma molécula? É a realidade? Claro que não. O modelo é apenas uma representação das posições de equilíbrio dos núcleos, mais alguns pressupostos sobre ligação. Há um interessante vídeo do laboratório de *F. P. Brooks, Jr.*, da Universidade de Carolina do Norte intitulado "Como é uma proteína?" Mostra 40 representações diferentes (fazendo-me lembrar uma colecção de gravuras em madeira de *Hokusai* chamada "36 vistas do Monte Fuji") de uma e só uma enzima, superóxido dismutase — um modelo "ball-and-stick", um modelo "space-filling", o campo electrostático sentido por uma carga-sonda perto da molécula, e por aí a fora[26].

Deixem-me voltar ao problema de comunicação. Os químicos são compelidos a comunicar informação tridimensional em duas dimensões. Mas não têm *talento* para isso. Os jovens não são escolhidos nem se tornam químicos com base na sua habilidade artística.

Portanto as pessoas têm que fazer aquilo para que não têm jeito. É a vida! Os químicos sobrevivem, à custa de inventar um código para comunicar estruturas tridimensionais. *E* treinam pessoas nesse código. Partes desse código são conhecidas dos químicos como projecções de Fischer ou Newman, ou como a representação traço-cunha. A molécula de etano, C_2H_6 , é representada em duas geometrias possíveis, **1** e **2**.

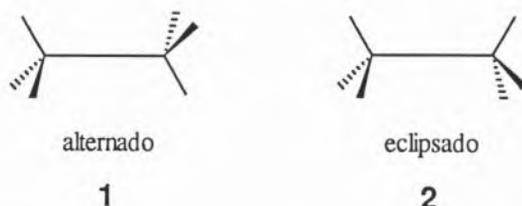
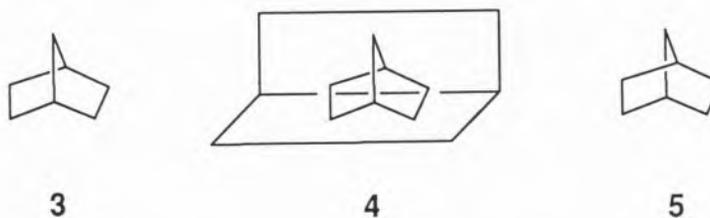


Figura 3. Algumas das maneiras como a molécula de C_2 aparece neste mundo. No sentido dos ponteiros do relógio, começando às 10h 30m: a) algumas curvas de energia potencial para a molécula de C_2 diatómica [29a]; b) etano, etileno, acetileno; c) um com-

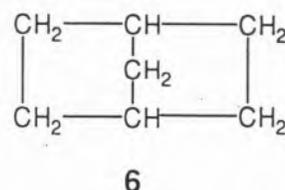
Reparem noutra peça do código: o carbono é o vértice do gráfico que tem quatro linhas ligadas a ele, mas não tem escrito C. Há hidrogénios no fim das linhas. Também não têm nomes. A notação é simples: uma linha sólida está no plano do papel, uma em forma de cunha para a frente, uma tracejada para trás. Isto pode ser o suficiente para algumas pessoas verem estas estruturas erguer-se do papel, mas os circuitos neurónicos que controlam a representação ficam gravados para o resto da vida quando se mexe (com as mãos, não num computador) num modelo "ball-and-stick", olhando para o desenho.

É fascinante ver estruturas químicas flutuando nas páginas de qualquer revista e constatar como, a partir dessa informação mínima, as pessoas conseguem realmente *ver* as moléculas na sua imaginação. Os indícios da tridimensionalidade são mínimos. As moléculas flutuam e geralmente fica-se desencorajado quando se tenta pôr uns planos de referência para ajudar a vê-las (**3** vs. **4**).



Alguns químicos confiam tanto no código que nem desenhavam **3**, mas sim **5**. Qual é a diferença? Uma linha "cruzada" em vez de "interrompida". Um indício tão trivial para reconstruir a tridimensionalidade, como o de uma parte da molécula estar atrás da outra, é dado em **3**, falta em **5**! A pessoa que desenha **5** está a fazer muitos pressupostos sobre a sua audiência. Eu aposto que ele ou ela nem pensa nisso.

As políticas das revistas, as suas limitações económicas e a tecnologia disponível limitam não só o que é impresso, mas também o que nós pensamos acerca das moléculas. Tome-se o norbornano, C_7H_{12} , molécula **3**. Até cerca de 1950, nenhuma revista no mundo estava preparada para compôr esta estruturas como **3**. Em vez disso, ela aparecia na revista como **6**.



Ora toda a gente sabia, desde 1874, que o carbono era tetraédrico, significando isto que as suas quatro ligações se formavam segundo as quatro direcções que radiam do centro dum tetraedro para os seus vértices. Podem ver esta geometria nos dois átomos de

carbono das estruturas **2** e **3**. Teria sido fácil adquirir ou construir modelos moleculares. No entanto, eu suspeito que a imagem ou ícone do norbornano que um químico típico tinha na cabeça por volta de 1925 era **6** e não **3**. Estava condicionado pelo que via na revista ou livro de texto — uma imagem. Era levado a actuar, ao sintetizar uma molécula derivada desta, por exemplo, por aquela imagem irrealista.

Talvez não seja diferente da maneira como encaramos o romântico na nossa vida, equipados com um conjunto sortido de imagens soltas saídas de novelas e filmes.

Estilo

Todos os manuais de escrita científica que tenho visto exortam ao uso dum estilo impessoal, sem agente, super-racional. Por favor, meus senhores, dêem-nos os factos e só os factos!

Os meus artigos podem-se reconhecer numa revista só pela proporção

de espaço dado ao material gráfico ou ao tracejado das minhas orbitais. Os artigos de *R. B. Woodward* eram reconhecíveis pela elegância (construída) do seguimento da história científica e, na elegância correspondente, pela cadência das suas palavras. Sou capaz de ler um artigo de *Jack Dunitz*, de *Rolf Huisgen*, *Rudolf Hoppe* ou *Bill Doering* e ouvir as suas vozes nestes artigos, com tanta certeza como oíço a voz de *A. R. Ammons*, um grande poeta americano, ou de *Bertold Brecht*, um alemão, quando vejo o seu trabalho numa página impressa.

Ter um estilo está na natureza de qualquer ser humano criativo. Por que razão eu havia de escrever a minha teoria da mesma maneira que *Bill Goddard*, um teórico que admiro, quando ninguém espera que *Karlheinz Sotckhausen* e *Pierre Boulez* escrevam peças para piano com a mesma sonoridade?

Lutas Dialécticas

Um artigo científico agradável, equilibrado, pode esconder fortes correntes emocionais, manobras retóricas e jogos de poder. Uma já foi referida — O desejo de convencer, o grito "eu tenho razão, ninguém mais tem razão", confrontando-se com as regras estabelecidas de civismo que supostamente regem o comportamento académico. Depende do indivíduo o ponto onde este equilíbrio é abalado.

Outro diálogo de que não se ouve falar é entre experiência e teoria. Não há nada de especial na relação amor-ódio entre experimentalistas e teóricos em Química. Podem substituir por "escritor" e "crítico" e falar de literatura ou encontrar o análogo na economia. As linhas mestras da relação são facilmente caricaturadas — os experimentalistas acham que os teóricos não são realistas, que constroem castelos no ar. No entanto, precisam das estruturas de conhecimento que os teóricos proporcionam. Os teóricos podem desconfiar das experiências, desejar que as pessoas fizessem aquela experiência que falta, mas onde estariam os teóricos se não houvesse nenhum contacto com a realidade?

Uma manifestação engraçada dos sentimentos em relação a esta questão pode ser encontrada na discussão quase teórica, às vezes longa, dos artigos experimentais. Estas secções contêm, em parte, uma verdadeira busca de explicações, mas, por outro lado, o que se



encontra nelas é uma tentativa para usar o ideal reducionista aceite (com a sua exagerada adoração do mais matemático) — para impressionar os colegas. Pelo contrário, nos meus artigos, geralmente ponho mais referências a trabalho experimental do que devia, porque estou a tentar "comprar tempo de credibilidade" da minha audiência experimentalista. Se eu mostrar aos químicos experimentais que conheço o seu trabalho, talvez eles me concedam algum tempo e oiçam as minhas especulações.

Outra luta, relacionada, é entre Química pura e aplicada. É interessante reflectir que esta separação tem talvez as suas raízes na Alemanha do meio do século XIX; parece a este observador que na outra potência da época, a Inglaterra, a distinção era menos rígida. É muito típico de um artigo de Química pura e procura duma justificação em termos de aplicações industriais. Mas ao mesmo tempo, há como que um recuo, uma falta de vontade de lidar com o mundo sem regras, tremendamente complicado de, por exemplo, a catálise industrial. E, nos meios industriais, há uma procura de credenciais académicas (muito típica, por exemplo, dos líderes da indústria química na Alemanha).

O Id liberta-se

Uso a palavra sujeito no sentido psicanalítico, referindo-me ao complexo de desejos e terrores instintivos que habitam o inconsciente colectivo. Por um lado, estes impulsos irracionais, onde figuram proeminentemente o sexo e a agressão, são o nosso lado escuro. Por outro lado, eles providenciam a força motriz da actividade criadora [27].

O irracional parece ter sido efectivamente suprimido do mundo escrito da ciência. Mas, claro, os cientistas são humanos, não obstante pretenderem fortemente não o ser. As forças ilógicas internas empurram para fora. Para onde? Se não são autorizadas a aparecer à luz do dia, na página impressa, elas rastejam ou explodem de noite, às escondidas, onde ninguém vê como se é desagradável. Refiro-me, obviamente, ao processo de avaliação anónimo e e às incríveis respostas irracionais libertas por bons cientistas, geralmente racionais. É preciso desinibir de vez em quando...

Na verdade, acho que o que salva o artigo de Química da insipidez é que a sua linguagem está sob tensão. Estamos a tentar comunicar coisas que talvez não possam ser transmitidas em palavras mas exijam outros sinais — estruturas, equações, gráficos. E estamos a tentar, a todo o custo, eliminar a emoção daquilo que dizemos. O que é impossível. Assim as palavras que dizemos sobrecarregam-se, de vez em quando, com a tensão de tudo o que *não* foi dito...

Enfim, acontecem muitas coisas num artigo científico. Vou poupá-los aos quadros que tenho visto pendurados em muitos laboratórios, que apresentam o verdadeiro significado de frases feitas. Como "Um regime de arrefecimento lento ao longo de quatro semanas produziu 90% de rendimento de cristais pretos de..." quer dizer que "Fui de férias e esqueci-me de lavar o balão. Quando voltei..." E por aí fora.

Quero voltar à complexidade de decidir o que é verdadeiro no processo científico. Num artigo recente, *Harald Weinrich* [28] descreve o artigo clássico de *Watson e Crick* sobre a estrutura do

DNA na *Nature* em 1953. É sucinto, tem uma sequência dedutiva, é elegante. *David Locke*, no seu livro, analisa a estrutura retórica e o uso da ironia no mesmo artigo[17]. Acho que a maior parte dos leitores fica imediatamente convencida de que o modelo de Watson e Crick era o verdadeiro e que tinha que ser assim. E é assim (com umas variações mínimas nos esquemas de ligações de hidrogénio em formas pouco vulgares de DNA). O modelo de Watson e Crick estava e está certo. Pouco mais é preciso.

Mas depois, em 1968, *Watson* escreveu um livro, "A Dupla Hélice", em que conta a história do que realmente aconteceu. Claro que é uma história egoísta e pouco simpática ou imparcial para *Rosalind Franklin* e outros. A história de *Watson* faz lembrar uma das quatro versões do mesmo acontecimento contadas no genial filme *Rashomon* de *Akira Kurosawa*. São precisas as outras versões, que alguns historiadores nos proporcionaram. Mas não se pode questionar que a descrição de *Watson* é vibrante e cheia de vida. Conta-nos como viu a verdade e acho que é um grande livro.

Então (e aqui estou a seguir *Weinrich*) o que é a verdade: o artigo de

Watson e Crick de 1953 ou o livro de *Watson* de 1968? O último diminui o primeiro? Isto exige reflexão.

Que fazer?

Tentei desmontar o artigo científico, calcificado na sua presente forma há cem anos, roubando linguagem à teoria da crítica. Acho que teria feito isto melhor com um texto à minha frente, mas corria o risco de me porem um processo por difamação ou de perder amizades. E faz parte da natureza humana não sermos capazes de criticar verdadeira e profundamente o nosso próprio trabalho. Portanto, não o posso fazer a mim próprio. Mas tenho a certeza de que todos os químicos conhecem soberbos exemplos daquilo a que me refiro, em especial no trabalho dos cientistas de que menos gostam.

Faço esta desmontagem com cuidado e sem malícia. Gosto muito desta ciência molecular. Gosto da sua riqueza e da sua simplicidade subjacente, mas, acima de tudo, da variedade que dá vida e riqueza e ideia de conjunto a toda a Química. Deixem-me dar um exemplo na Figura 3. Vejo C_2 num arco de carbono e na cauda do cometa de Halley[29a]. Vejo-o no acetileno, no etileno, no etano.

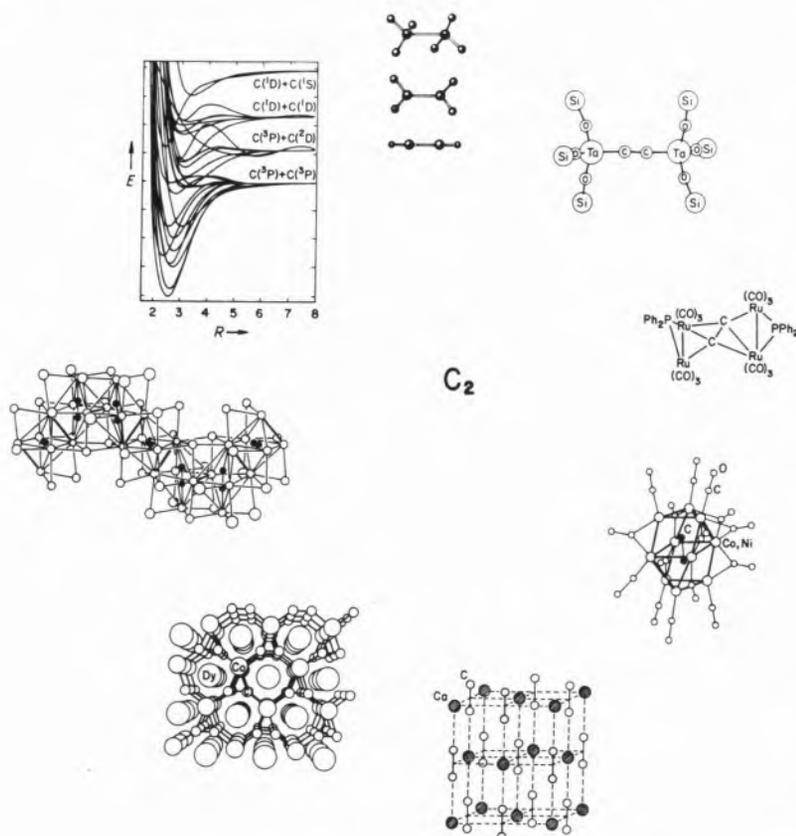
Vejo-o nos belos complexos moleculares de *P. Wolczanski*, [29b] *M. I. Bruce*, [29c] e *G. Longoni* [29d] e seus colaboradores, como se vê na Figura 3. Vejo-o no CaC_2 nos carbonetos de terras raras de *W. Jeitschko* [29e] e *A. Simon* [29f] e seus colaboradores. É espantoso!

Sei que esta riqueza foi criada por seres humanos. Por isso entristece-me ver a sua humanidade suprimida na maneira como se exprimem por escrito. Acho que há alguns perigos reais na atitude intelectual dos cientistas actuais e no seu modo ritual de comunicação.

São estes os perigos, tal como os vejo. A aceitação fácil duma filosofia reducionista, um modo vertical de compreensão tomado como o *único* modo de compreensão, criam um hiato entre nós e os nossos amigos das artes e letras. Eles sabem que não há só uma maneira de "compreensão" ou de lidar com a morte de um parente, uma eleição política, ou uma gravura em madeira de *Ernst Ludwig Kirchner*. O mundo lá fora é avesso ao reducionismo e, se insistimos que tem de ser redutível, só nos estamos a pôr numa caixa muito bonita. A caixa é a pequena classe de problemas que pode ser compreendida por um processo reducionista.

Um segundo perigo, mais específico, para o artigo científico, é que ao desumanizar o nosso modo de comunicação, tirando ele a emoção, a motivação, alguma irracionalidade, corremos o risco de fazer mais do que expulsar os Filósofos Naturais. Com certeza que o fizemos. Mas, ao fim de 150 anos nessa linha, o que criámos foi um produto mecânico, ritualizado, que propaga 3×10^5 vezes por ano a ideia de que os cientistas são secos e insensíveis, que só respondem a pequenas ondas dum espectro. O público em geral julga-nos pela natureza do nosso produto. Como pode fazer outra coisa, se nós nem nos esforçamos o suficiente para lhe explicar o que fazemos, neste nosso mundo barricado com calão?

Que fazer? Eu seria por uma humanização geral do processo de publicação. Deixem-nos relaxar aquelas regras estritas, editoriais ou auto-impostas, e descrever por palavras, num artigo científico primário, a motivação, pessoal ou científica, a emoção, a historicidade, talvez alguma da irracionalidade. E se ocupar mais umas páginas? *Podemos* manter a par da literatura química e, da maneira que as coisas são, distinguir, sem muito esforço, a massa de trabalho



amorfo do que é realmente inovador. As palavras humanizadoras não vos vão desviar; podem até encorajar-nos a ler com mais cuidado a substância do que é dito. Eu intercedia por uma valorização e ensino do estilo, na língua escrita e falada, tanto na do país de cada um, como no inglês. Acho que a Química tem muito a ganhar se se puder reviver o fundo pessoal, emocional e estilístico, da luta que conduz à descoberta e criação do mundo molecular.

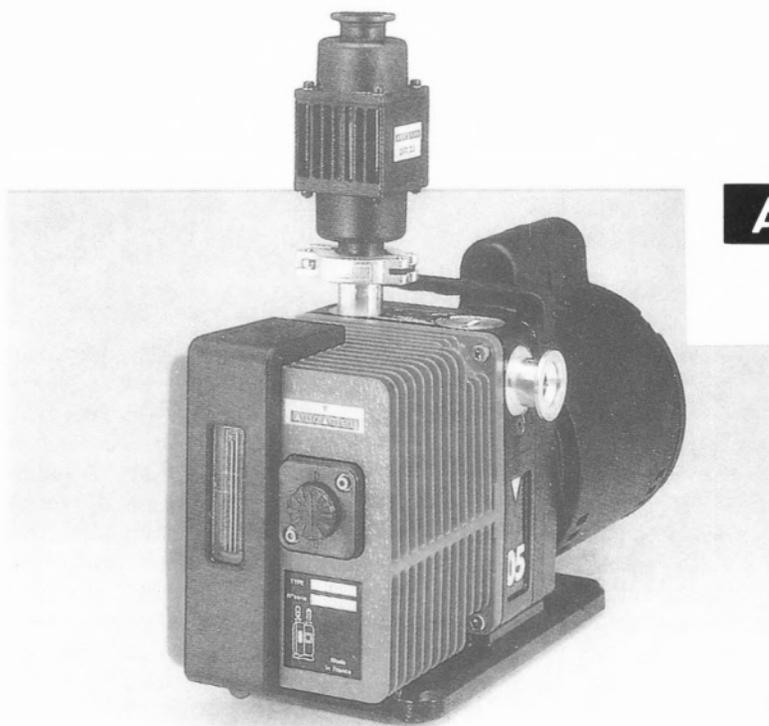
REFERÊNCIAS

1. A *Angewandte Chemie* tem sido muito importante para mim e é um prazer dedicar esta conferência ao corpo editorial, passado e presente, duma das melhores revistas do mundo.
2. E. Garfield: *Essays of an Information Scientist*, ISI Press, Philadelphia, 1981, pg. 394-400 e referências aí citadas.
3. a) S. Shapin, *Social Stud. Sci.* **14** (1984) 487; b) P. Dear, *Isis* **76** (1985) 145; c) F.L. Holmes in P. Dear (Ed.): *the Paper Laboratory*, University of Pennsylvania Press, Philadelphia, em publicação.
4. F. Goldmann, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **21** (1888) 1176.
5. Para uma discussão sobre a evolução da escrita científica ver B. Coleman, *New York Times Book Review*, September 27, 1987, pg. 1; também R. Wallsgrove, *New. Sci.* **116** (1987) nº 24, pg. 55.
6. O. J. Scherer, T. Brück, *Angew. Chem.* **99** (1987) 59; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **26** (1987) 59.
7. A versão aqui apresentada é a inglesa. A *Angewandte Chemie* é única ao imprimir (desde 1963) o mesmo artigo em versões inglesa e alemã.
8. Para uma demonstração da gama de atitudes cerca do que é a Ciência, ver a discussão nas páginas da *Nature* (**330** (1987)308, 689; **331** (1988) 129, 558) na sequência de um artigo de T. Teocharis e M. Psimopoulos (*Nature* **329** (1987) 595).
9. A frase usada é de J. Ziman: *Reliable Knowledge*, Cambridge University Press, Cambridge, Inglaterra 1987. Discordo de alguns pontos deste livro, mas não há nenhuma descrição melhor e mais humanística sobre o que é e deveria ser a Ciência do que este pequeno volume.
10. M. Berthelot: *Chimie Organique Fondée sur la Synthèse*, Tome 2, Mallet-Bachelier, Paris 1860. Ver também J.-P. Malrieu, *L'Actualité Chimique* 1987, nº 3, pg. IX; A. F. Bochkov, V. A. Smit: *Organicheskii Sintez* (Organic Synthesis), Nauka, Moscovo 1987; e um ensaio "Em Louvor da Síntese" por R. Hoffmann, publicado em *Química-Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, **49** (1993) 28.
11. Para diferentes visões do modo como a Ciência opera, ver: a) P. Feyerabend: *Against Method*, NLB, Londres 1975; *Wider den Methodenzwang*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1976; b) B. Latour, S. Woolgar: *Laboratory Life*, Princeton University, Princeton 1986; c) K. Knorr-Cetina: *Die Fabrikation von Erkenntnis*, Suhrkamp, Frankfurt am Main, 1984.
12. Fui lembrado da importância da distinção indivíduo-sistema por uma conversa com Barry Carpenter. Estou-lhe grato por uma discussão das questões levantadas por este ensaio, bem como a outro colega, Bruce Ganem, pelos seus comentários.
13. Devem-se distinguir vários tipos de reducionismo. Ver o interessante debate entre S. Weinberg (*Nature* **330** (1987) 443; **331** (1988) 475) e E. Mayr (*Nature* **331** (1988) 475 e referências aí citadas).
14. Ver, entre outros, K. Mislow, P. Bickart, *Israel J. Chem.* **15** (1976/77) 1; D. W. Theobald, *Chem. Soc. Rev.* **5** (1976) 203.
15. R. G. Bergman, numa conferência não publicada sobre "Values in Science", cita alguns dados não tratados, fascinantes, sobre este problema, obtidos da sua experiência nas revistas *Organic Synthesis* e *Inorganic Synthesis*.
16. Latour e Woolgar ([11b], pg. 183) são muito desdenhosos em relação a este tipo de embebecimento com a verificabilidade e reprodutibilidade dos factos científicos a que aludo aqui. Acho que foram apanhados na ideologia consistentemente inquiridora e céptica da sua investigação antropológica, de outro modo incisiva, sobre como são construídos os factos científicos. Deviam dar uma olhadela à produção industrial, sistemática, espalhada por todo o mundo, de produtos farmacêuticos, só para dar um exemplo duma actividade experimental reprodutível
17. D. Locke: *Science as Writing*, a ser publicado.
18. J. Derrida no seu ensaio "Signature Event Contest" em *Marges de la Philosophie*, Editions Minuit, Paris 1972, pg. 365-393; tradução (por A. Bass): *Margins of Philosophy*, University of Chicago Press, Chicago 1982, pg. 307-330.
19. L. F. Fieser, M. Fieser: *Style Guide for Chemists*, Reinhold, New York 1960, pg. 51-52.
20. P. B. Medawar, *Saturday Review*, August 1, 1964, pg. 42, também defende que o formato convencional do artigo científico representa mal os processos do pensamento que participam na descoberta.
21. Ver R. Hoffmann, *Am. Sci.* **75** (1987) 619; **76** (1988) 182.
22. Para uma introdução às teorias literárias modernas, ver T. Eagleton: *Literary Theory*, University of Minnesota Press, Minneapolis 1983.
23. C. F. von Weizsäcker: *Die Einheit der Natur*, dtv, Munique 1974, pg. 61-83.
24. Para uma descrição do processamento da informação geométrica e topológica que tem lugar na Química Orgânica, ver também N. J. Turro, *Angew. Chem.* **98** (1986) 872; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **25** (1986) 882.
25. Pierre Laszlo escreveu um artigo esclarecedor sobre a ilustração técnica ("The Pictures of Science") que é relevante para a minha discussão. Uma versão francesa deste artigo ("Science en Images") foi aceite para publicação em *ECALE*, Nº 2, publicada por Ecole Cantonale d'Art, Lausana.
26. M. Pique, J. S. Richardson, F. P. Brooks, Jr., *Invited Videotape, 1982 SIGGRAPH Conference*. Estou grato a J. S. Lipscomb por me dar a ver este vídeo.
27. P. B. Medawar diz, segundo as mesmas linhas, que "... os cientistas não deviam ter vergonha de admitir... que aparecem hipóteses no seu pensamento por caminhos travessos..." (ver [20]).
28. H. Weinrich, *Merkur* **39** (1985) Nº 436, p. 469. Estou grato a P. Göllitz por chamar a minha atenção para este artigo.
29. a) As curvas de energia potencial do C₂ foram adaptadas de P. P. Fougere e R. K. Nesbet (*J. Chem. Phys.* **44** (1966) 285); b) [(tBu₃SiO₃)₃Ta]₂C₂: R. E. LaPointe, P. T. Wolczanski, J. F. Mitchell, *J. Am. Chem. Soc.* **108** (1986) 6382; c) [Ru₄C₂(PPh₂)₂(CO)₁₂]: M. I. Bruce, M. R. Snow, E. R. T. Tiekink, M. L. Williams, *J. Chem. Soc. Chem. Comm.* (1986) 701; d) [Co₃Ni₇C₂(CO)₁₅]³⁻: G. Longoni, A. Ceriotti, R. Della Pergola, M. Manassero, M. Perego, G. Piro, M. Sansoni, *Phil. Trans. R. Soc., London, Sr.* **A308** (1982) 47; e) DyCo₂: W. Jeitschko, M. H. Gerss, *J. Less Common Met.* **116** (1986) 147; f) Gd₁₂C₆: A. Simon, E. Warkentin, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **497** (1983) 79

Tradução de "Under the Surface of the Chemical Article", *Angewandte Chemie Int. Ed. Engl.* **27** (1988) 1593 por M. J. C., com a autorização do autor e do editor.

* Este artigo deriva do texto duma conferência apresentada no *Chemiedozententagung* em Mainz, a 14 de Março de 1988. Celebrava-se, numa sessão especial, o 100º aniversário da *Angewandte Chemie*

**R. Hoffmann é professor de Química na Universidade de Cornell, Nova Iorque, Estados Unidos da América



▼
ALCATEL

CIT

**INFORME-SE SOBRE AS
NOVAS ROTATÓRIAS
PASCAL
DA ALCATEL.**

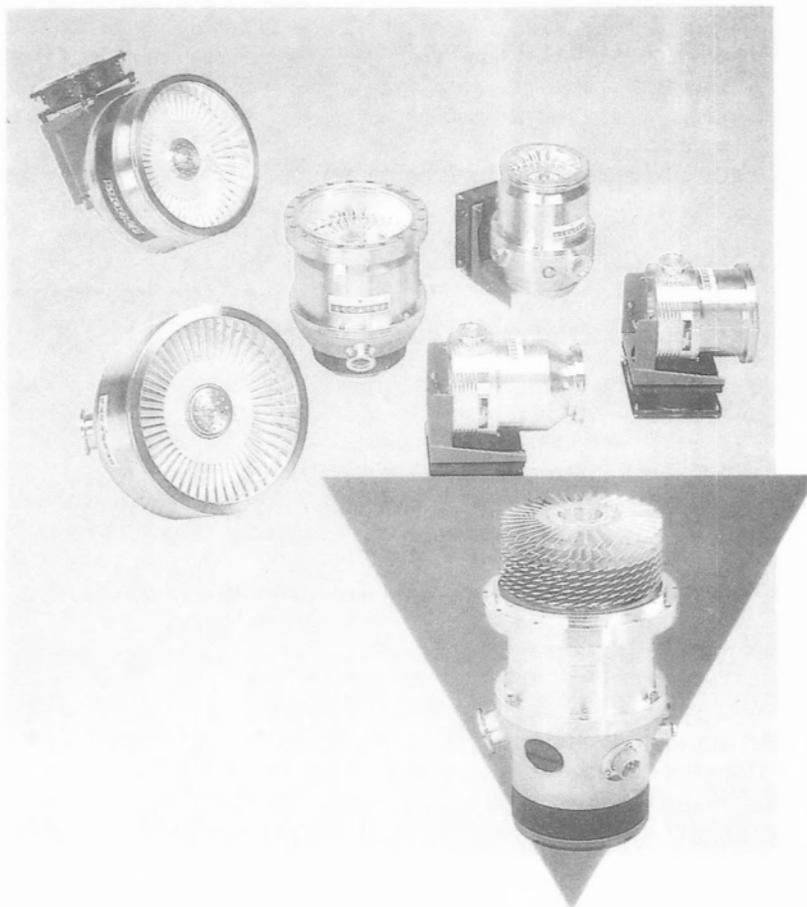
**UM DIA TODAS AS
ROTATÓRIAS
SERÃO ASSIM...**

EM QUALQUER POSIÇÃO

**27.000 r. p. m.
apenas**

**O QUE NOS PERMITE
FAZER LOCALMENTE,
TOTAL SERVIÇO E
MANUTENÇÃO**

**VERIFIQUE QUE 90%
DO EQUIPAMENTO DE
VÁCUO, EM PORTUGAL,
DESDE 1991, É
ALCATEL**



CAIOLAB

**PRAÇA D. AFONSO V, 120
4100 PORTO (PORTUGAL)
TELEFONE 68 20 29
FAX: 6102406**

O "SATIS 16-19: Science and Technology in Society"

MARIANA P. PEREIRA*

Este artigo pretende mostrar que o SATIS 16-19 é um importante banco de recurso para o ensino das ciências e realçar o papel relevante do trabalho dos professores no seu desenvolvimento e produção.

O SATIS, *Science and Technology in Society* — onde se insere o SATIS 16-19 — será, talvez, pouco conhecido entre muitos dos sócios da SPQ, embora já tenha sido alvo de várias acções de divulgação, uma das quais através da referência à unidade sobre os CFC, no 13^o Encontro da SPQ [1]. É publicado pela Association for Science Education (ASE), uma das mais fortes associações de professores de ciências do mundo [2].

A problemática de Ciência-Tecnologia-Sociedade (CTS) tem estado presente, há vários anos, não só nos documentos de discussão de linhas curriculares, como nos próprios materiais produzidos pela ASE que, logo no início da década de 80, publicou dois bons projectos sobre Ciência e Sociedade. Trata-se de *Science in Society* [3] e *Science in Social Context*. Na sequência destas publicações, a ASE alargou depois o seu trabalho delineando o projecto *SATIS-Science and Technology in Society*. Estes três projectos, que não serão abordados neste artigo, são aqui referidos para situar o Projecto SATIS 16-19, dirigido por Andrew Hunt, e cujo volume 4, englobando as unidades 76 a 100, foi recentemente adquirido pela SPQ e encontra-se à disposição dos sócios na Sede.

O *SATIS 16-19* é um projecto CTS, constituído por unidades que focam a ciência e as suas relações com a tecnologia e a sociedade. Destina-se a alunos no nível etário 16 a 19 anos, isto é, alunos que têm um bom nível de conhecimentos em ciência e já desenvolveram capacidades básicas — nomeadamente de análise, de interpretação e de comunicação de dados e resultados (apresentados na forma de gráficos ou

tabelas). O material constante das unidades, desde que não alterado, pode ser livremente copiado pela escola que o adquirir para utilização pelos seus alunos, sem infringir o *copyright*. É comercializado sob a forma de um dossier; esta forma possibilita o arquivo de referências adicionais sobre os temas.

A abrir o volume 4 do SATIS 16-19, após a apresentação do projecto e dos livros de apoio, encontra-se um Guia, com várias secções. Numa primeira secção explica-se o formato das unidades, compreendendo quatro componentes: (i) as notas para o professor (referindo os tópicos a explorar, as capacidades a desenvolver, a estrutura da unidade, as ligações com outras unidades SATIS, uma sugestão de abordagem e a indicação de outras fontes recentes de informação); (ii) o guia de estudo, onde se sugerem actividades para os alunos; (iii) as páginas de informação, com a indicação de novas ideias e de assuntos e aplicações relacionados com a ciência e a tecnologia, apresentadas sob modos diversos, como artigos de jornais, tabelas, mapas, diagramas, relativamente aos quais os alunos têm de lhes dar sentido e forma apropriados, por exemplo, escrevendo uma carta, redigindo um artigo ou elaborando um painel.

A secção seguinte contém uma sinopse de cada unidade, incluindo uma descrição sumária das actividades para os alunos. Identificam-se ainda as diferentes metodologias de ensino passíveis de serem aplicadas, indicando-se em que unidades se utilizam. Assim, facilita-se a visualização das metodologias activas (e de "novos" recursos) nas unidades SATIS 16-19, como: análise de dados (com recurso à folha de cálculo); construção e interpretação de diagramas e mapas; debate; design e implementação; jogo de papéis e dramatização; especulação e tempestade cerebral; estudos de caso; modelação (com recurso a computadores); pesquisa (recorrendo a uma base de dados); resolução de problemas e tomada de decisão; relato técnico e

relato para um público não especialista.

Finalmente as unidades são classificadas consoante as áreas que focam e as disciplinas de estudo. As áreas em foco são, por exemplo, a natureza da Ciência; a natureza da tecnologia; a tomada de decisão na sociedade, relacionada com a ciência e a tecnologia; a agricultura e a horticultura; a conservação de alimentos; a indústria; os materiais; os recursos energéticos; os recursos minerais e a água; a qualidade dos produtos e a segurança; as questões ambientais; a saúde e a medicina; as tecnologias de comunicação. Nas disciplinas de estudo — Biologia, Ciências do Ambiente, Ciências da Terra, Física e Química — são explicitados os temas e os contextos, as capacidades e os tópicos dos programas. Relativamente à Química, e referindo-nos agora ao que existe nos quatro conjuntos de unidades, tem-se:

— *Temas e contextos*: aspectos da química ligados à saúde e à segurança; aspectos económicos; tecnologia química e indústria; a química e os seres vivos; química da cor; recursos minerais e água; propriedades e utilização dos materiais.

— *Capacidades*: análise e interpretação de dados (em tabelas, gráficos e quadros); cálculos (envolvendo a quantidade de substância, ou variação de energia, por exemplo); modelação molecular; investigações experimentais; relato escrito; relato oral.

— *Tópicos dos programas*: estrutura atómica e ligação; catálise; química do carbono — hidrocarbonetos, derivados halogenados, compostos oxigenados; técnicas de química — cromatografia, espectrometria de IR, espectrometria de massa, espectrometria NMR, titulação; variações de energia durante os processos químicos, equilíbrio, factores que afectam a localização de uma indústria; isomerismo, incluindo quiralidade; tabela periódica — elementos do bloco d, do grupo 3, do grupo 7; mudanças de fase, radioactividade, solubilidade, estados da matéria — sistemas coloidais; reacções — de ácido-base, de hidrólise, de precipi-

TABELA 1

Temas, tópicos, capacidades e actividades das unidades do SATIS 16-19 ligadas a assuntos de Química

Unidade 78

Working in production*Temas:* Tecnologia química na indústria*Tópicos dos programas:* Trabalho na indústria*Capacidades:* Trabalho em grupo, Análise crítica*Actividades:* Simulação de produção

Unidade 81

Ethanol - is it the fuel for the future*Temas:* Tecnologia química na indústria, Química ambiental, incluindo poluição e seu controlo*Tópicos dos programas:* Biomassa*Capacidades:* Comunicação oral, Análise de argumentos*Actividades:* Debate, Jogo de simulação

Unidade 89

Handedness*Temas:* Química nos sistemas vivos (saúde e aspectos de segurança).*Tópicos dos programas:* Isomerismo*Capacidades:* Modelação, Visualização a três dimensões, Comunicação oral*Actividades:* Modelação molecular, Conferência para um público não especialista

Unidade 90

Do we need zinc*Temas:* Química nos sistemas vivos, Saúde e aspectos de segurança da Química*Tópicos dos programas:* Técnicas de Química - titulações, Reacções químicas - complexação*Capacidades:* Planeamento e realização de uma experiência, Comunicação oral*Actividades:* Investigação experimental, Debate

Unidade 91

Helping asthmatics*Temas:* Química nos sistemas vivos, Química do carbono, Saúde e aspectos de segurança da Química*Tópicos dos programas:* Técnicas de Química - IR, Solubilidade*Capacidades:* Análise e interpretação de dados, Realização de cálculos*Actividades:* Análise e interpretação de dados, Realização de cálculos - quantidade de substância

Unidade 92

Printed circuit boards*Temas:* Tecnologia química na indústria, Propriedades e utilização de materiais*Tópicos dos programas:* Catálise, Tabela periódica - bloco d, Reacções químicas - complexação, Reacções químicas - reacções redox*Capacidades:* Design, Planeamento e realização de uma experiência*Actividades:* Produção de um diagrama, Investigação experimental

Unidade 93

Biblical Metals*Temas:* Propriedades e utilizações de materiais*Capacidades:* Comunicação oral: Comunicação escrita, Leitura e interpretação, Pesquisa e selecção*Actividades:* Relato oral - redacção de um documento (artigo), Leitura e resposta a questões estruturadas, Pesquisa em base de dados

Unidade 95

Acidification - getting the message across*Temas:* Química ambiental, incluindo poluição e seu controlo; Recursos minerais e água*Capacidades:* Design, Comunicação escrita, Pesquisa e selecção*Actividades:* Produção de um diagrama ou de um painel, Produção de relato escrito, Pesquisa em bases de dados

tação iónica, redox, com radicais livres.

No conjunto 4 das unidades SATIS, os títulos das unidades mais ligadas a assuntos de Química encontram-se referidos na Tabela 1, onde também se indicam os tópicos, as capacidades e as actividades aí incluídas.

O SATIS é produzido por professores que trabalham voluntariamente para, em conjunto, discutirem a produção de unidades, compartilhando ideias relativas a temas motivadores para os alunos. Para obterem um ponto de vista actualizado sobre o estado de desenvolvimento dos temas, os professores compilam artigos de revistas e pedem a colaboração de especialistas em instituições profissionais e em outras organizações. Para delinearem metodologias apropriadas consultam elementos e especialistas da área. Apoiados pela sua prática docente, elaboram então uma primeira versão da unidade; esta é editada por uma pequena equipa de professores-editores e é testada em escolas com professores e alunos. A fase seguinte corresponde à preparação do conjunto de unidades, como é o caso do SATIS 16-19 - volume 4. Como resultado obtém-se um importante banco de recursos no ensino das ciências.

Para ilustrar os aspectos das unidades, apresentam-se extractos de duas delas.

NOTAS

1. Na comunicação intitulada "Ciência para o cientista, ciência para o cidadão - uma conciliação possível e necessária" apresentada no Encontro em Janeiro de 1992, referiu-se o SATIS 16-19 e, nomeadamente, a unidade 12 "Trouble with CFC" (Oliveira V. & Pereira, M.. Resumos do 13º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química, E2, Lisboa, 1992)

2. Tem-se conhecimento que alguns sócios da SPQ são sócios da ASE. Lembra-se ainda que há onze anos foi publicado um artigo sobre "O que é a ASE?" (M. Pereira, *Boletim da SPQ* (1980), 49-50)

3. Em 1984, no 7º Encontro Anual da SPQ, o Dr. R. Ingle orientou uma oficina de trabalho sobre um dos "populares" exercícios de simulação e tomada de decisão do Projecto *Science in Society*, sobre a exploração de diferentes fontes de energia, cuja tradução foi autorizada para utilização no Encontro.

Do we need zinc?

Questions

- 3.3 What shape (coordination geometry) would you expect for 5- and 6- coordinate complexes of zinc?
- 3.4 The pH of an aqueous solution of zinc sulphate is significantly below 7. Can you account for this?
- 3.5 Aluminium(III) and iron(III) are metal ions with high polarising power which cause coordinated water molecules to lose protons. How does the ratio of charge to size for zinc compare with the same ratios for aluminium and iron?
- 3.6 A zinc ion can form a complex with the glycinate ion which is a bidentate ligand. The formula of the complex is: $Zn(\text{glycinate})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The glycinate ion is: $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CO}_2^-$; suggest how it coordinates with the $Zn(II)$ ion and the probable shape of the complex. You will find it helpful to try to make a molecular model of the structure.

Although the full chemical role of zinc in most metabolic pathways is very far from understood, an example is given here which illustrates some of the factors in table 5 on page 6.

Carbonic anhydrase

Carbonic anhydrase is an enzyme in the red blood cells of mammals. It was the first zinc metallo-enzyme to be discovered (in 1940). It regulates the carbon dioxide level in the blood by catalysing the slow equilibrium reaction:



It increases both forward and back reactions by a factor of 10^7 compared with the uncatalysed rate. The enzyme contains one Zn^{2+} ion coordinated to three N atoms (from histidine units) and to one O (in a water molecule).

Questions

- 3.7 Can you propose a mechanism for the catalytic activity of the zinc enzyme given that it is known that in the presence of hydroxide ions the slow equilibrium process is replaced by the following fast reaction? (Table 6 may help you.)
- $$\text{CO}_2(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq}) \rightarrow \text{HCO}_3^-(\text{aq})$$
- 3.8 Cadmium and mercury are highly toxic. One of the reasons that they are poisonous is that they disrupt the action of metallo-enzymes containing zinc. Where do these metals appear in the Periodic Table? Suggest an explanation for their toxic effects.

Helping asthmatics

Part 2 A synthesis for salbutamol

One possible laboratory synthesis of salbutamol begins with aspirin. It is clearly an advantage to choose a starting material which is cheap and readily available in a pure state. Figure 7 shows the sequence of reactions used in the synthesis.

Organic reactions are notorious for their poor yields. There are sometimes several alternative 'side-reactions' making a variety of other products. Chemists have to devise ways of separating the by-products from the compound which they are trying to make. Also, most organic reactions reach a rather unsatisfactory equilibrium point and do not "go to completion". Compared with many other organic syntheses, the figures for the yields in the

synthesis of salbutamol from aspirin are exceptionally good (table 1).

Reaction step	Yield/per cent
1	85
2	60
3	75
4	55
5	60

Table 1 This table shows percentage of the theoretical yield for each of the separate steps of the synthesis in figure 7

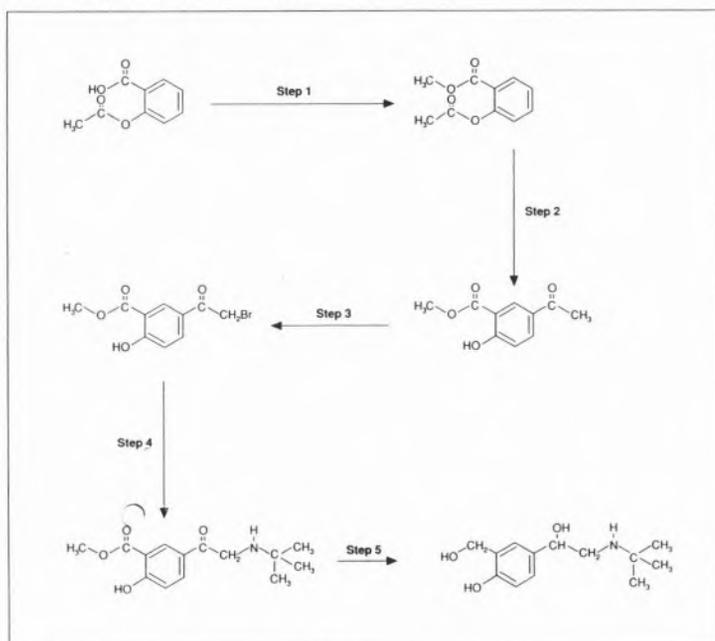


Figure 7 The five stages in the synthesis of salbutamol from aspirin

Cromatografia

JOÃO COSTA PESSOA*

1 - INTRODUÇÃO

Os métodos de separação constituem normalmente uma parte importante das análises e a "cromatografia" é sem dúvida a técnica separativa mais importante em Química Analítica, sendo os cromatógrafos instrumentos indispensáveis nos laboratórios de Química Analítica modernos. Neste texto pretende-se apenas apresentar uma introdução muito geral ao método.

Quem primeiro usou a designação cromatografia foi o botânico russo M. Tswett [1,2], que a utilizou para descrever a separação de pigmentos corados de plantas com uma coluna de vidro contendo CaCO_3 . Os diversos compostos apareciam como bandas coradas na coluna e daí a escolha do nome do método (do grego: cor - chroma e escever - graphhein).

Tswett escolheu o nome de cromatograma para designar a série de bandas que se formavam na coluna de cromatografia quando realizou a separação de pigmentos de folhas.



Figura 1 — Cromatograma segundo a definição de Tswett

Na mesma época outros investigadores, em trabalhos independentes, estabeleceram técnicas experimentais semelhantes à proposta por Tswett, mas foi só depois de 1940 que a cromatografia teve um desenvolvimento espectacular devido aos trabalhos de Martin e Synge [3], que introduziram uma técnica que hoje é conhecida como cromatografia líquido-líquido. Estes autores deram também uma contribuição importante para a compreensão dos métodos cro-

matográficos, comparando-os com as separações por extracção em contra-corrente e introduzindo a "teoria dos pratos" (ver adiante).

Como alternativa à teoria dos pratos apareceram mais tarde as "teorias de velocidade" (ver adiante) e um dos trabalhos que teve mais impacto foi o de Deemter, Zwietering e Klinkenberg [4].

O desenvolvimento da cromatografia em papel teve origem nos trabalhos de Martin colaboradores [5] e devido à sua grande simplicidade esta técnica teve rapidamente um grande desenvolvimento para a análise de produtos orgânicos e inorgânicos. Os trabalhos de Ismailov e Shraiber [6] conduziram ao desenvolvimento das técnicas de cromatografia executadas em camadas de adsorvente — cromatografia em camada fina, que em muitas separações apresentam diversas vantagens em relação à cromatografia em papel. A cromatografia em camada fina desenvolveu-se especialmente depois dos trabalhos de Stahl [7,8], que utilizou com sucesso camadas finas de adsorvente.

A cromatografia de permuta iónica passou a ser uma técnica importante depois de ter sido utilizada com êxito na separação de terras raras [9,10], isolamento de elementos transurânicos [11,12] e na separação de aminoácidos [13,14]. Em 1975 esta técnica ganhou novo impulso com a introdução pela DIONEX de novas concepções para os sistemas de detecção.

Em 1959 surgiu a cromatografia de exclusão molecular. Esta técnica tem sido aplicada em bioquímica e biotecnologia (ex. separação de proteínas e polisacarídeos) e em estudos de polímeros.

Em 1952 Martin e James aplicaram a cromatografia na separação de gases — cromatografia em fase gasosa ou cromatografia gasosa. Hoje pode dizer-se que esta técnica é, em geral, a mais adequada para separação e doseamento de substâncias gasosas ou voláteis.

A cromatografia com fluidos supercríticos (SFC) foi utilizada pela primeira vez em 1962 por Klesper, Corwin e Turner [17] para a separação de porfirinas de níquel. O primeiro aparelho comercial só surgiu em 1981 e desde então o número de aplicações tem cres-

cido enormemente.

É difícil definir com rigor o que se entende por cromatografia dada a grande variedade de sistemas e técnicas que têm sido aplicadas. No entanto todos os métodos envolvem uma fase estacionária e uma fase móvel. Os componentes da mistura e separar são deslocados ao longo da fase estacionária pelo caudal da fase móvel e a separação resulta das diferentes velocidades de migração (migração diferencial) dos diversos componentes da amostra. Alternativamente pode dizer-se que os vários componentes da amostra são retardados na sua passagem, na proporção das suas interações com a fase estacionária.

A fase estacionária pode ser um líquido ou um sólido. Se for um líquido pode estar depositada sobre partículas de um suporte sólido inerte e ser manuseada como se se tratasse de um sólido. Nas "colunas abertas" utilizadas frequentemente em cromatografia gasosa ou com fluidos supercríticos, a fase estacionária "líquida" é depositada sobre as paredes internas da coluna, podendo ou não existir um suporte sólido intermédio. Resumindo, podem considerar-se as seguintes configurações para uma fase estacionária em cromatografia:

1 — partículas de um sólido com ou sem fase "líquida" a recobri-las enchem o interior de uma coluna,

2 — partículas de um sólido também com ou sem fase "líquida" a recobri-las, estão depositadas sobre uma placa de vidro ou de outro material adequado. É o caso da cromatografia em camada fina,

3 — fibras de um polímero com uma fase "líquida" a recobri-lo, constituindo um leito aberto. É o caso da cromatografia em papel, em que este polímero é constituído por fibras de celulose e a fase estacionária é água adsorvida a essas fibras.

4 — uma fase "líquida" está depositada sobre a parede interna de um tubo aberto. É o caso das colunas capilares utilizadas com frequência em cromatografia gasosa.

A fase estacionária "líquida" pode estar ligada a um suporte sólido por forças de adsorção física ou por ligações covalentes. Conforme a natureza destas

fases, estas podem ter características semelhantes às de um líquido ou não. Em alguns casos tem-se simplesmente um grupo funcional mais ou menos complexo ligado a um suporte sólido por uma ligação covalente.

A cromatografia em papel e em camada fina, em que o processo cromatográfico se desenrola numa câmara fechada em que a fase estacionária e a móvel contactam com a "atmosfera", constituem técnicas que é costume designar por "leito aberto". As restantes técnicas cromatográficas desenrolam-se em colunas que constituem sistemas fechados que contêm as fases estacionária e móvel.

2 - CONSTITUIÇÃO DE UMA COLUNA CROMATOGRÁFICA

Uma coluna cromatográfica de enchimento (fig. 2) é constituída de um modo geral por um tubo de material quimicamente inerte (vidro, aço inoxidável, resina epoxi, etc.), na qual foram introduzidas partículas de um sólido finamente dividido. Uma placa filtrante situada na extremidade inferior da coluna, não deixa estas partículas sair e considera-se que estas ocupam posições fixas na coluna.

Dentro do possível as partículas do enchimento estão dispostas de uma maneira uniforme e deixando um mínimo de espaços vazios entre elas. Estas partículas podem ser de forma esférica ou irregular e podem ser porosas ou não.

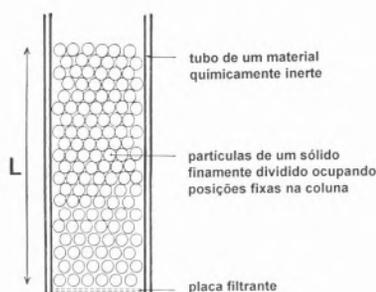


Figura 2 — Representação esquemática de uma coluna cromatográfica de enchimento. A fase móvel ocupa os espaços intersticiais entre as partículas

Numa outra configuração de colunas cromatográficas, a fase estacionária recobre as paredes internas de um tubo de diâmetro relativamente pequeno 0.10-0.35 mm, não havendo neste caso um enchimento; é o caso, já referido, das colunas abertas.

3 - CLASSIFICAÇÃO DOS MÉTODOS CROMATOGRÁFICOS

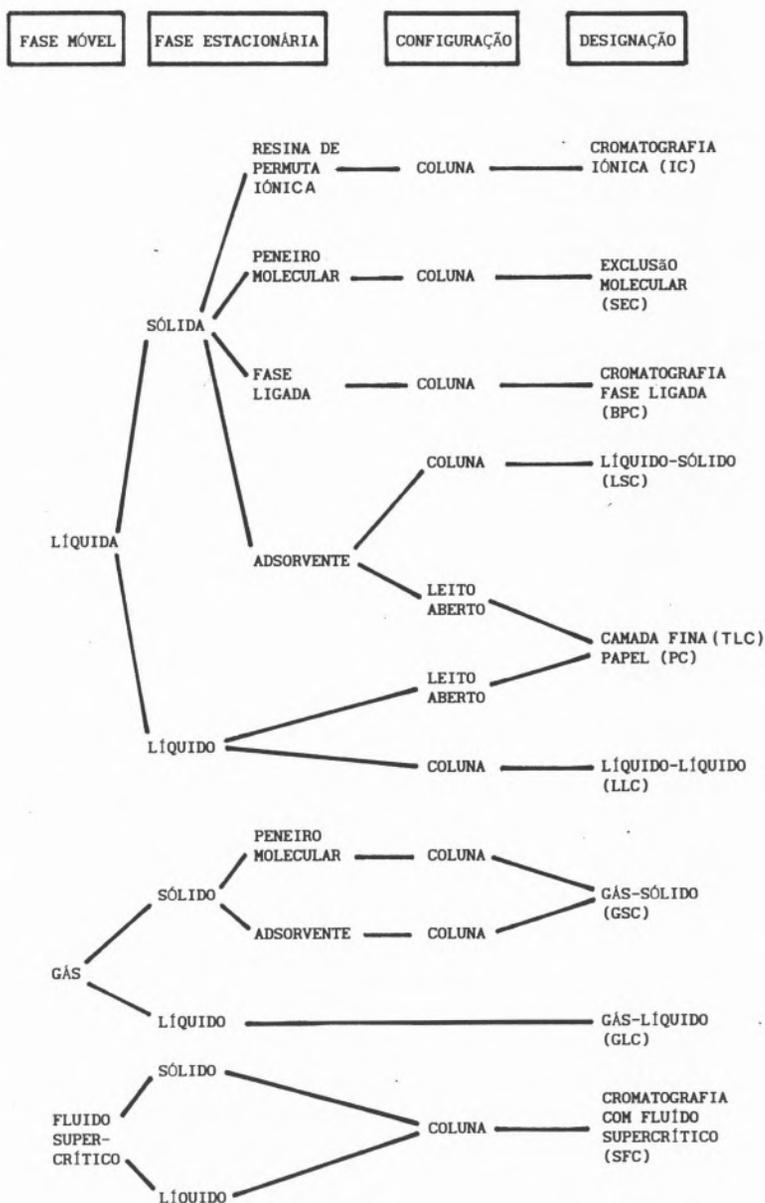
Há diversas maneiras de classificar os métodos cromatográficos, por exemplo:

- (i) — com base na natureza da fase móvel e estacionária,
- (ii) — com base na natureza das interações moleculares envolvidas no

mecanismo de separação,

Na fig. 3 esquematiza-se uma classificação das técnicas cromatográficas quanto à natureza da fase móvel e estacionária.

Na tabela 1 esquematiza-se como se podem classificar os métodos cromatográficos relativamente ao tipo de mecanismo de separação que é predominante.



No desenvolvimento por eluição, uma pequena quantidade de amostra (que corresponde a uma pequena percentagem da capacidade da fase estacionária) é introduzida no topo da coluna (ver. fig. 4). No caso da cromatografia líquida, a fase móvel — eluente — é um solvente (ou mistura de solventes), que é feito passar continuamente através da fase estacionária e que tem menor afinidade por esta que qualquer dos componentes da amostra. A zona contendo a amostra será assim obrigada a deslocar-se ao mesmo tempo que se vai verificando um equilíbrio de distribuição dos vários solutos entre a fase móvel e a fase estacionária.

Os componentes da amostra movem-se ao longo da coluna a uma velocidade que é determinada pelas suas interações com a fase estacionária e fase móvel. Os componentes são eluídos pela ordem da sua afinidade pela fase estacionária, e a sua velocidade de migração é menor que a do eluente.

Se se representarem graficamente as concentrações de soluto à saída da coluna, as quais podem ser medidas utilizando um detector adequado, pode-se obter uma variação do tipo da que se representa na figura 5. Este tipo de representação corresponde a uma generalização do conceito de cromatograma, que aliás é um dos mais vulgarmente utilizados. Admitindo que durante o ensaio cromatográfico o caudal de eluente se mantém constante, há uma proporcionalidade directa entre volumes escoados e tempos de escoamento, pelo que a representação gráfica da concentração de soluto à saída da coluna em função do tempo de ensaio ou do volume de efluente da coluna são semelhantes.

Alternativamente, se se representarem as concentrações de soluto em função do comprimento da coluna (antes de os componentes saírem), pode-se obter uma representação gráfica do tipo que se apresenta na figura 6.

Em cromatografia pode haver variação em mudar o eluente um certo tempo depois do início da eluição. Os eluentes são então escolhidos de maneira a terem um poder de eluição crescente, ou seja, uma maior afinidade da fase móvel pelos componentes que ainda estão retidos (ou pela fase estacionária),

Tabela 1 - Classificação dos métodos cromatográficos de acordo com o tipo de mecanismo de separação predominante.

Mecanismo de retenção	Natureza da fase móvel	Técnica	Designação do método
CROMATOGRAFIA DE ADSORÇÃO			
Os solutos ou estão adsorvidos fisicamente nos 'locais activos' de de um adsorvente sólido ou estão na fase móvel	GÁS	Coluna	Cromatografia gás-sólido (GC ou GSC)
		Leito aberto	Cromatografia em camada fina (TLC) Cromatografia em papel (CP)
	LÍQUIDO	Coluna	Cromatografia líquido-sólido (LSC e HPLC)
		FLUIDO SUPERCRÍTICO	Coluna
CROMATOGRAFIA DE PARTIÇÃO			
Os solutos ou estão dissolvidos na fase estacionária líquida ou estão na fase móvel	GÁS	Coluna	Cromatografia gás-líquido (GC ou GLC)
		Coluna	Cromatografia líquido-líquido (LLC ou HPLC)
	LÍQUIDO	Leito aberto	Cromatografia em camada fina (TLC)
CROMATOGRAFIA EM FASE LIGADA			
Os solutos ou estão 'dissolvidos' numa fase estacionária ligada quimicamente a um suporte sólido inerte ou estão na fase móvel	GÁS	Coluna	Cromatografia gasosa (GC)
		LÍQUIDO	Coluna
	Leito aberto		Cromatografia em camada fina (TLC)
	FLUIDO SUPERCRÍTICO	Coluna	Cromatografia com fluidos supercríticos (SFC)
CROMATOGRAFIA DE PERMUTA IÓNICA			
Os solutos iónicos ou estão ligados a grupos de carga oposta ligados de forma fixa a um suporte sólido ou estão dissolvidos na fase móvel	LÍQUIDO	Coluna	Cromatografia de permuta iónica (IEC e IC)
		Leito aberto	Cromatografia em camada fina (TLC)
			Cromatografia em papel (CP)
CROMATOGRAFIA* DE EXCLUSÃO			
Moléculas que penetram nos poros da fase estacionária atrasam o seu movimento relativamente a outras que permanecem fora dos poros. A separação dá-se por dimensões das moléculas dos solutos	GÁS	Coluna	Cromatografia gasosa (GSC)
	LÍQUIDO	Coluna	Cromatografia de exclusão (EC)
CROMATOGRAFIA* DE AFINIDADE			
Retenção dos solutos por interações específicas com uma fase estacionária especialmente escolhida para os solutos a reter	LÍQUIDO	Coluna	Cromatografia de afinidade (AC)

Tratam-se de processos separativos com características gerais distintas dos anteriores. Na cromatografia de exclusão não é suposto haver interações químicas dos solutos com a fase estacionária. Na cromatografia de afinidade cada fase estacionária é apenas adequada para separar um soluto ou um grupo muito restrito de solutos.

Figura 3 — Classificação das técnicas cromatográficas de acordo com a natureza das fases móvel e estacionária

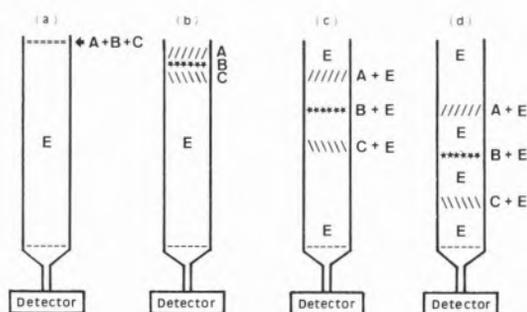


Figura 4 — Desenvolvimento por eluição e formação do cromatograma

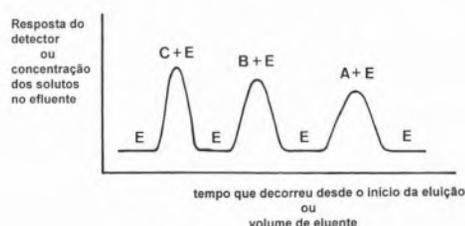


Figura 5 — Cromatograma apresentado como representação gráfica da resposta do detector (que se admite ser proporcional às concentrações dos solutos no efluente) em função do tempo que decorreu desde que a amostra foi introduzida na coluna (ou, o que é equivalente, do volume de efluente gasto desde o início da sua eluição)

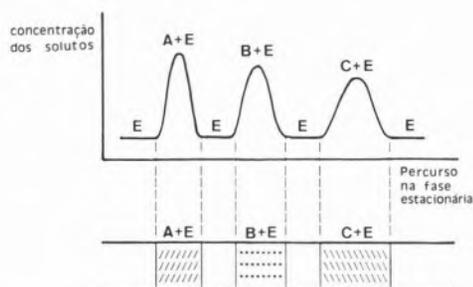


Figura 6 — Cromatograma apresentado como representação gráfica de concentrações de soluto em função da distância percorrida ao longo da coluna. Este tipo de representação pode ser o mais adequado no caso das técnicas cromatográficas em leito aberto: cromatografia em papel e cromatografia em camada fina

promovendo assim o movimento dos solutos ao longo da coluna.

É mais frequente proceder-se a uma mudança gradual na composição do eluente. Isto pode ser essencial para conseguir a separação de solutos com uma ampla variedade de afinidades pela fase estacionária num tempo razoável. Para isso a proporção de mistura de dois ou mais solventes é modificada gradualmente para que se dê um aumento progressivo no poder de eluição da fase móvel.

Em cromatografia gasosa, o gás de arrastamento (que não tem afinidade pela fase estacionária) passa continua-

mente através da coluna, a qual está dentro de um forno aquecido a temperatura adequada. A amostra (gasosa ou um líquido volatilizado) é introduzida no fluxo gasoso e é transportada ao longo da coluna onde se vai processar a separação. Cada um dos componentes da mistura distribui-se entre a fase móvel e a estacionária de acordo com a sua volatilidade e afinidade pela fase estacionária, emergindo da coluna em tempos diferentes. Durante o processo cromatográfico a temperatura do forno pode ser aumentada de maneira a obter-se uma separação num tempo razoável.

4 - TEORIA DA CROMATOGRÁFIA POR ELUIÇÃO

4.1 - Introdução

Um dos objectivos importantes de qualquer teoria de cromatografia é prever o que vai suceder aos solutos da amostra a analisar à medida que se vão deslocando ao longo da coluna. Nomeadamente interessa determinar qual a localização e forma dos picos correspondentes aos vários componentes da amostra, ou seja, o respectivo cromatograma. Interessa também prever a eficiência das separações e de que modo essa eficiência pode ser melhorada por modificação das condições experimentais.

Tentemos imaginar o comportamento de uma molécula de soluto numa coluna cromatográfica. Durante o seu movimento, esta molécula vai ter um grande número de transferências entre a fase móvel e a estacionária. A molécula só se desloca ao longo da coluna quando está na fase móvel. O tempo que fica em cada fase depois de uma transferência depende em primeiro lugar da sua afinidade para cada uma das fases. Em segundo lugar depende de acidentalmente ganhar energia cinética suficiente para efectuar a transferência inversa; nestas condições, dada a variedade de tempos de permanência em cada fase, as velocidades a que as moléculas de um mesmo soluto se movem variam consideravelmente. Algumas deslocam-se rapidamente por permanecerem na fase móvel por um tempo relativamente grande; outras podem-se atrasar por ficarem retidas na fase estacionária por um intervalo de tempo maior do que a média. A consequência destes processos individuais de movimento é um alargamento das bandas de cada soluto.

O alargamento de uma banda aumenta à medida que esta se desloca ao longo da coluna. Isto sucede porque decorreu mais tempo para permitir o alargamento da banda e se terem dado um maior número de transferências. Identicamente solutos que sejam mais retidos e que, portanto, demorem mais tempo a saírem da coluna, corresponderão a bandas mais largas do que os menos retidos e que saíem mais rapidamente da coluna.

Desde que os processos de alargamento das bandas sejam determinados por factores aleatórios, que durante o processo cromatográfico as interações tenham a mesma ordem de grandeza

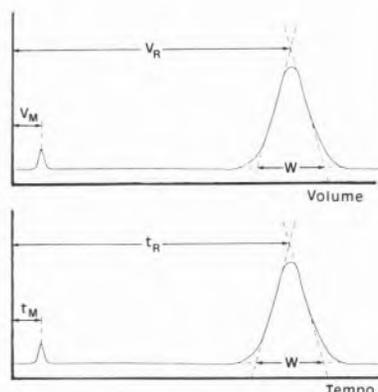


Figura 7 — Cromatograma de uma amostra com um componente para ilustrar as definições de volume e tempo de retenção

para todas as moléculas de um mesmo soluto e que o número de transferências de fase seja suficiente grande, as bandas serão simétricas e terão uma forma gaussiana.

Considerem-se os cromatogramas representados na figura 7, que correspondem a uma amostra contendo apenas um soluto. O volume de eluente necessário para se atingir o máximo de concentração do soluto designa-se por *volume de retenção* — V_R . Se a banda for simétrica, V_R corresponde ao volume total de eluente necessário para eluir metade da quantidade de soluto.

Se o cromatograma corresponder a uma representação de concentrações em função do tempo do ensaio, ou seja, o tempo que decorreu desde a introdução da amostra, define-se de maneira semelhante o *tempo de retenção*, que se representa por t_R (fig. 7).

O tempo de retenção para qualquer componente que não seja retido na coluna será designado por t_M . Já se referiu que o correspondente volume de retenção se designa por volume "morto" (ou volume vazio) e corresponde ao volume ocupado pela fase móvel dentro da coluna (V_M).

4.2 - Distribuição do soluto entre a fase móvel e a estacionária

A separação por cromatografia resulta das diferenças de afinidade dos componentes pela fase móvel e fase estacionária e o volume de retenção (ou o tempo de retenção) de um soluto vai depender do equilíbrio de distribuição desse soluto entre a fase móvel e a estacionária.

Vamos admitir que uma substância solúvel no eluente e representada genericamente por A é introduzida na coluna cromatográfica. Algumas moléculas desta substância poderão ligar-se momentaneamente à fase móvel. Estabelecer-se-á assim um equilíbrio:



Designando por $[A]_S$ a concentração de A na fase estacionária e por $[A]_M$ concentração de A na fase móvel, a constante de equilíbrio — K — que se pode considerar como sendo a constante de distribuição entre a fase estacionária e a móvel, será dada por:

$$K = \frac{[A]_S}{[A]_M}$$

A utilização de uma constante de equilíbrio nas teorias de cromatografia pressupõe que o sistema está em equilíbrio químico. Em muitas circunstâncias está-se perto de uma situação de equilíbrio e a utilização de K pode considerar-se aproximadamente válida.

4.3 - Teoria de equilíbrio ou teoria dos pratos

Considera-se que a coluna cromatográfica é constituída por uma sequência de pequenas colunas — os pratos teóricos ou andares teóricos — onde se supõe que se atinge o equilíbrio de distribuição do soluto entre a fase móvel e a estacionária. Cada prato teórico encontra-se em comunicação com o que o precede e com o seguinte. Em cada prato pressupõe-se que se atinge o equilíbrio

de distribuição instantaneamente. Admitindo que a amostra contendo um soluto é introduzida no primeiro prato, uma vez distribuído entre as duas fases, o soluto que ficou na fase móvel desloca-se ao longo da coluna para o prato seguinte, onde se irá dar o equilíbrio de distribuição com uma nova secção de fase estacionária (fig. 8). Como a concentração de soluto na fase móvel no 1º prato diminuiu, parte do que estava na fase estacionária passa para a fase móvel, ou seja, vai-se estabelecer uma nova situação de equilíbrio nesse "prato".

À medida que este processo decorre, ao fim de algum tempo já praticamente não haverá soluto no 1º prato e o máximo de concentração de soluto está num dos pratos subsequentes, isto é, dá-se um movimento efectivo do soluto e um alargamento da zona onde este existe na coluna.

Encarado sob esta perspectiva, o processo cromatográfico corresponde à existência de uma série de passos discretos, cada um deles equivalente a um processo de extracção simples. Sucede que a cromatografia é um fenómeno dinâmico e não uma série de passos estáticos. No entanto, se estes passos ou pratos forem muito pequenos, os processos estáticos e dinâmicos tornam-se praticamente equivalentes.

O comprimento da coluna correspondente a cada um destes "pratos imaginários" ou "pratos teóricos" é designado por altura equivalente a um prato teórico, ou abreviadamente por HETP (do inglês: Height Equivalent to a Theoretical Plate) ou simplesmente por H. Quanto mais pequeno for H mais passos de equilíbrio de distribuição haverá nessa coluna e mais eficiente se considera essa coluna. Na prática isto significa que a coluna deverá ser melhor para separar

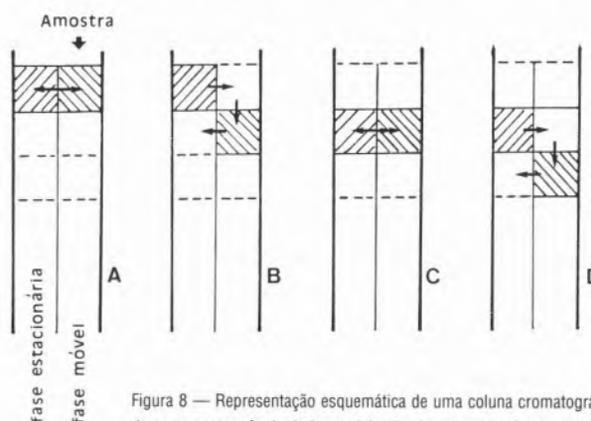


Figura 8 — Representação esquemática de uma coluna cromatográfica constituída por uma sequência de "pratos" (ou "andares") em cada um dos quais se atinge instantaneamente o equilíbrio de distribuição de solutos

os componentes de uma mistura.

Uma coluna cromatográfica de comprimento L pode então considerar-se formada por uma justaposição de um número N de pequenas colunas de secção igual à da coluna cromatográfica e de altura H. Tanto N como H são uma medida da eficiência da coluna e existirá a relação:

$$H = \frac{L}{N}$$

Para que a coluna seja eficiente interessa portanto que o valor de H seja pequeno, ou seja, que o valor de N seja grande.

Note-se que a designação número de pratos teóricos para N é utilizada à semelhança do que é feito na destilação fraccionada.

4.4 - Teorias de velocidade

Embora a teoria dos pratos (teoria de equilíbrio) tenha sido bastante útil na compreensão dos processos cromatográficos e permita visualizar facilmente o conceito de prato teórico, deve notar-se que um "prato teórico" não tem realidade física. Assim, este e o conceito de altura equivalente a um prato teórico devem apenas ser encarados como critérios de eficiência de colunas e é como tal que são encarados nas teorias de velocidade.

A teoria dos pratos permite ter em conta as variáveis que afectam a velocidade de deslocamento de um soluto, mas não é possível utilizá-la para um tratamento teórico dos factores responsáveis pelo alargamento das bandas, nomeadamente a sua relação com os diâmetros das partículas do enchimento, coeficientes de difusão dos solutos ou constantes de distribuição.

Nas teorias de velocidade o processo cromatográfico é considerado como sendo essencialmente dinâmico pelo que o equilíbrio de distribuição do soluto entre as fases móvel e estacionária não é atingido. O alargamento das bandas é devido principalmente a que os diversos processos de transferência de massa que ocorrem quando um soluto se desloca ao longo da fase estacionária se dão a uma velocidade finita e não instantânea.

Sendo o alargamento das bandas um fenómeno inevitável em cromatografia e intimamente ligado ao conceito

de eficiência do sistema cromatográfico, interessa examinar quais os principais factores que originam a dispersão progressiva do soluto ao longo da coluna. Nas teorias de velocidade o fenómeno de alargamento da banda é considerado como resultando da combinação aditiva de todos os processos que para ele contribuem e procura-se quantificar cada um. Uma vez identificados e contabilizados cada um destes factores cinéticos, o alargamento da banda é quantificado através de uma expressão de H (altura equivalente a um prato teórico) em função da velocidade linear da fase móvel.

Nas teorias de velocidade o significado físico de H é diferente do considerado na teoria dos pratos pois é definido em termos da variância por unidade de comprimento da coluna, podendo no entanto mostrar-se que as expressões para N e H da teoria dos pratos também são válidas nas teorias de velocidade.

REFERÊNCIAS

1. M. S. Tswett, *Ber. Dtsch. Bot. Ges.*, **24** (1906) 316
2. M. S. Tswett, *Ber. Dtsch. Bot. Ges.*, **24** (1906) 384.
3. A. J. P. Martin e R. L. M. Synge, *Biochem. J.*, **37** (1943), proc. xiii e refs. aí citadas.
4. J. J. van Deemter, F. J. Zuiderweg e A. Klinkenberg, *Chem. Eng. Sci.*, **5** (1956) 271.
5. R. Consden, A. H. Gordon e A. J. P. Martin, *Biochem. J.*, **38** (1944) 224.
6. Ref. em L. S. Ettre e A. J. Zlatkis (eds.) "75 Years of Chromatography — A Historical Dialog", *J. Chromat. Library*, Vol. 17, Elsevier, Amsterdam, (1979), p. 413-417.
7. E. Stahl, *Pharmazie*, **11** (1956) 633.
8. E. Stahl (ed.), *Thin Layer Chromatography*, Academic Press, New York (1962).
9. F. H. Spedding, A. F. Voight, E. M. Gladrow e N. R. Sleight, *J. Am. Chem. Soc.*, **69** (1947) 2859.
10. E. R. Tompkins e S. W. Mayer, *J. Am. Chem. Soc.*, **69** (1947) 2859.
11. G. T. Seaborg, "The Transuranium Elements", em *Encyclopedia of the Chemical Elements*, Reinhold, New York, (1968) e refs. aí citadas.
12. J. E. Salmon e D. K. Hale, "Ion Exchange, a Laboratory Manual",

Academic Press, New York, (1959) e refs. aí citadas

13. S. Moore e W. H. Stein, *J. Biol. Chem.*, **176** (1948) 367.
14. S. Moore e W. H. Stein, *J. Biol. Chem.*, **192** (1951) 663.
15. P. Flodin e J. Porath, *Nature*, **183** (1959) 1657.
16. A. T. James e A. J. P. Martin, *Biochem. J.*, **50** (1952) 679.
17. E. Klesper, A. H. Corning e D. A. Turner, *J. Org. Chem.*, **27** (1962) 700.

BIBLIOGRAFIA GERAL

1. R. Stock e C. B. F. Rice, "Chromatographic Methods", Chapman and Hall, London, 3ª Ed., 1974. Livro geral de cromatografia incidindo sobre os vários métodos cromatográficos e suas aplicações.
2. A. Braithwaite e F. J. Smith, "Chromatographic Methods", Chapman and Hall, 4ª Ed., London, 1985. Livro com características semelhantes ao anterior. Sendo mais recente incide menos sobre os fundamentos das técnicas.
3. J. M. Miller, "Chromatography: Concepts and Contrasts", John Wiley & Sons, New York, 1988. Bom livro para cromatografia gasosa, líquida e em camada fina.
4. J. Willett, "Gas Chromatography", ed. ACOL, John Wiley & Sons, Chichester, 1987. Livro de cromatografia gasosa relativamente elementar.
5. S. Lindsay, "High Performance Liquid Chromatography", ed. ACOL, John Wiley & Sons, Chichester, 1987. Livro de cromatografia líquida relativamente elementar.
6. "Supercritical Fluid Chromatography", ed. por R. M. Smith, RSC Chromatography Monographs, Royal Society of Chemistry, London, 1988. Bom livro para cromatografia com fluidos supercríticos mas de nível evoluído.

* Departamento de Engenharia Química, IST

LUMISTOX - Analisador de Toxicidade



O *LUMISTox*, sistema de testes biológico desenvolvido pela firma DR. LANGE, permite determinar a toxicidade em amostras de águas, efluentes, solos, sedimentos e produtos químicos, de forma fácil, rápida e fiável.

O Luminómetro regista e interpreta as variações de emissão de luz, conhecida por bioluminescência, produzidas em fotobactérias, por exposição a substâncias tóxicas.

Como pré-teste, complemento ou substituto da análise química, o teste de toxicidade, obrigatório há anos nos Estados Unidos, está já contemplado nas Normas Europeias AFNOR T90-320, NEN 6516, DIN 38412 e em vias de publicação em Espanha.

Contacto:
LABNORMA, LDA
Rua Infanteria Dezasseis, nº 41, 2º
1200 LISBOA
Telef.: (01) 692414/692413
Fax: (01) 656262

SÉRIE 9000, o GC por excelência



Com a nova série 9000 da TREMATRICS entra-se numa nova era da Cromatografia em fase gasosa:

Possibilidade de utilização simultânea de 3 detectores, dispositivo auto-diagnóstico de aviso ao operador em caso de falha no sistema, teclado de pressão leve, visualização dos valores introduzidos, capacidade para 9 métodos em memória protegida, programação de 5 níveis de temperatura sem necessidade de recurso a mais do que um programa, controlo automático de válvulas via computador ou por tempo e opção para utilização abaixo da temperatura ambiente (até -90° C).

Opção, ainda, para 1 sistema de aquisição de dados com capacidade para ligar até 15 GC's e 1 sistema de injeção automática de amostras ("Headspace Samples").

Desde novos detectores, alguns de patente registada, para FID, ECD, FPD, RECD, PID, DID, NPD e TCD, passando pelo versátil injector capilar para trabalhos tanto em modo "split" como em "splitless", até ao sistema GC/MS que integra um espectrómetro de massa para testes de poluição, drogas, etc, este cromatógrafo combina a inovação dos 3 detectores simultâneos com a capacidade da cromatografia multi-dimensional.

Contacto:
REAGENTE 5 - Química e Electrónica, Lda.
Av. Fernão de Magalhães, 481
4300 PORTO
Tel: (02) 510 26 94/96
Fax: (02) 510 26 95

GASTEC Detecção de Gases e Vapores



Os sistemas de Detecção da *Gastec* permitem detectar vários gases (CO, CO₂, SO₂, H₂S, Cl₂, etc.) e medir a sua concentração.

Foram desenvolvidos no sentido de facilitar a análise de gases que normalmente requerem processos complicados e equipamentos sofisticados, tendo ainda a vantagem de não requerer conhecimentos específicos do operador.

A&D - Balanças Electrónicas (Japão)



Nova Balança microanalítica, modelo HA-202M, capacidade 42/210 g, resolução 0.01/01 mg.

Apresenta um novo design (ver figura), com acesso panorâmico (200°), multifunções, tecla de mudança da unidade de pesagem (g e mg), arredondamentos automáticos e auto-calibração.

IKA - Sistema Calorimétrico C 700



Aumento de Calorias?

Se quiser responder a esta questão terá que analisar o material correspondente. Isto é possível usando um calorímetro IKA. Este aparelho permite obter valores de poderes caloríficos passados 3 minutos após o início do ensaio com uma precisão superequivalente.

Devido à localização espacial dos sensores de temperatura no interior do vaso de decomposição, o microprocessador integrado no sistema C 7000 constrói com grande facilidade a curva temperatura-tempo.

O processo inovador de cálculo incluído no microprocessador garante análises com precisão superior às obtidas com sistemas isotérmicos e isobáricos.

Contacto:
EN - Equipamentos de Análise e Ensaio, Lda.
Rua Real, 1210 A/B Guarda, Moreira
4700 MAIA
Telef: (02) 9486905/9496847
Fax: (02) 9486132

ASI BIOQUAD - A solução para a sua fermentação



A ASI (Anglo Scientific Instruments) é uma empresa sediada em Congleton (Inglaterra), especialista na concepção e fabricação de espectrómetros de massa quadrupolares dedicados à resolução dos mais variados problemas analíticos, entre os quais a monitorização de processos de fermentação.

O ASI BIOQUAD consiste em um sistema de análise modular que permite analisar em poucos segundos a composição da fase gasosa existentes num fermentador, seja no "head space" como na própria fase líquida (sob a forma de gases dissolvidos).

O BIOQUAD permite monitorizar simultaneamente até 16 fermentadores, gerando e analisando gráficos de barras, curvas de tendências e tabelas de dados, permitindo ainda exportá-los para folhas de cálculos como o Lotus 123, Excel, etc.

O "know-how" consolidado ao longo dos anos da ASI e do Grupo KONIK, seus representantes exclusivos na Península Ibérica e América Latina, é a garantia da resolução do seu problema analítico.

GAS CHECK - o detector de fugas para TODOS os gases



O detector de fugas GAS CHECK de ION SCIENCE (Cambridge, Inglaterra) é um equipamento portátil (50x60x365 mm), com microprocessador incorporado, que permite a detecção automática de fugas de gases, sempre que estes sejam de composição distinta à da atmosfera na zona a analisar.

Sendo indicado para aplicações nas Áreas Industriais, Laboratorial, Médica e de Investigação, é ideal para CROMATOGRAFIA DE GASES, evitando a utilização incómoda de "água com sabão" (cujo limite de detecção é de 10^{-3} ml/seg), permitindo detectar fugas tão pequenas como 10^{-5} ml/seg (He).

O GAS CHECK opera mediante uma micro-célula de condutividade térmica (TCD) incorporada, permitindo obter uma leitura fiável no seu monitor digital em menos de 1 segundo.

A unidade básica incorpora no seu microprocessador rotinas de autodiagnóstico (falha na célula de detecção, falta de bateria, etc), alarme sonoro programável, leitura directa de fugas em ml/seg em duas escalas (analógica e digital), permitindo uma operação fácil, com o uso de apenas uma das mãos (ideal para locais de difícil acesso).

KONIK INSTRUMENTS, como fabricante de cromatógrafos de gases desde há 2 décadas aconselha a todos os utilizadores de cromatografia e demais técnicas analíticas (espectrometria de massa, espectrofotometria de absorção atómica, etc) a aquisição de uma unidade GAS CHECK.

ISS - a solução em bioquímica

A ISS (Integrated Separation Systems), empresa sediada em Natick (EUA) produz e comercializa sistemas de reagentes para aplicação na investigação microbiológica e genética, com especial incidência na separação de proteínas, ácidos nucleicos e outros produtos

de origem biológica ou artificiais.

Dentro da gama de produtos ISS, permitimo-nos salientar:

- colunas para FPLC, HPLC e cromatografia em coluna, compatíveis com qualquer sistema cromatográfico;
- consumíveis (tubos para microcentrifuga pontas para micropipetas, membranas para "blotting", etc.);
- géis de poliacrilamida;
- placas de PAGE vertical;
- sistemas e acessórios para electroforese.

Contacto:
KONIK INSTRUMENTS, S.A.
Rua Conde Redondo, 13 A-cv
1100 LISBOA, Tel: (1) 57 57 87
Fax: (1) 57 58 47

BIORAD - DIGILAB DIVISION



A Divisão Digilab da BIORAD, um dos primeiros fabricantes de ESPECTRÓMETROS DE INFRAVERMELHO POR TRANSFORMADORA DE FOURIER (FTIR), com uma experiência de mais de 20 anos, iniciou a sua actividade comercial em Portugal a partir do dia 1 de Janeiro último, sendo representada em exclusivo no nosso país por DIAS DE SOUSA, LDA.

Assim, estará finalmente disponível no mercado português a mais extensa gama de espectrômetros da FTIR, desde os modelos mais sofisticados para pesquisa, passando por modelos de aplicações específicas até aos espectrômetros de rotina. A BIORAD é igualmente fabricante de sistemas hifenados do tipo GC-FTIR ou TG-FTIR por exemplo, assim como de espectrômetros RAMAN e de uma vasta série de microscópios para ligação a FTIR.

Os últimos modelos de espectrômetros, lançados em Março 93 na Pittsburgh Conference em Atlanta (USA), os FTS 155 e o FTS 165, são aparelhos de altas performances, de utilização fácil e de alta fiabilidade. Estes equipamentos de preço competitivo permitem a utilização de micro-FTIR e de técnicas hifenadas sendo a direcção do feixe controlada pelo computador. Os espectrômetros são não só selados como igualmente excitados; só necessitam de ligação à corrente eléctrica para funcionarem. Já vêm equipados com o novo e potente software Win-IR que controla igualmente todo o equipamento e é capaz de satisfazer o espectroscopista mais exigente,

permitindo 3 níveis de sofisticação.

Com a representação da BIORAD-Digilab Division, DIAS DE SOUSA, LDA., torna-se igualmente o distribuidor em Portugal das bibliotecas e softwares SADTLER.

Contacto:
DIAS DE SOUSA, LDA.
Quinta da Piedade, lote 15
2625 PÓVOA DE ST.ª IRIA
Tel: 01 - 959 23 16/959 24 09
Fax: 01 - 959 08 13

CROMATÓGRAFO MAIS RÁPIDO DO MUNDO



A nossa representada CHROMPACK acaba de lançar no mercado um cromatógrafo de dimensões reduzidas, portátil, permitindo análises extremamente rápidas. O tempo de análise típica é de 60 segundos. O equipamento oferece ainda uma reprodutibilidade excelente.

Para o arranque o cromatógrafo precisa sómente de alguns segundos para estabilizar. Desta forma podem ser atingidas cerca de 650 análises/dia.

Os campos de aplicação típicos para esta unidade são os seguintes: monitorização de gás natural-on-line, análise dos gases provenientes de aterros e monitorização de emissões ou processo.

A CHROMPACK oferece 2 versões do micro GC: uma unidade de bancada e a versão completamente portátil, que inclui um cilindro de gás e bateria.

Contacto:
ELNOR
EQUIP. TÉCNICOS E DE LABORATÓRIO, LDA.
R. de Camões, 845, 4000 PORTO
Tel.: 410 25 05 — Fax 410 28 31

ANÁLISES DE UV/VIS NUNCA FORAM TÃO FÁCEIS



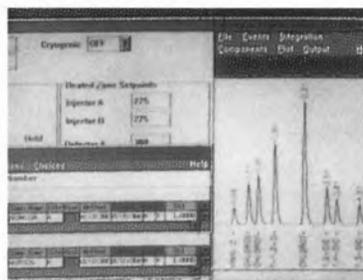
Simplicidade em análises de UV/VIS significa rapidez e resultados mais precisos.

O novo ESPECTROFOTÓMETRO DE UV/VIS LAMBDA 11 está orientado para laboratórios onde o UV/VIS é uma técnica de screening para uma variedade de amostras.

Cinco métodos préprogramados para recolha de espectros, programação de comprimentos de onda, absorvência vs tempo e análise quantitativa podem ser executados pelo LAMBDA 11, através da operação de uma única "tecla simples".

Métodos adicionais podem ser armazenados em memória e facilmente reutilizados.

TURBOCHROM 3



O software Turbochrom 3 da PE nelson tem mais poder que qualquer outro da sua classe.

Está baseado numa workstation de cromatografia em PC, que representa um conceito novo, tendo uma arquitectura de interfaces buffer, conexão com equipamentos de multi-fabricantes, e possibilidade de expansão, o que permite o máximo uso dos recursos existentes.

As forças principais são automatismo, validação, comunicação e produtividade. Velocidade, altas performances, e segurança são características básicas.

Extras:

1. A Interface A/D Series 900 Buffered permite adquirir dados de até 15 GC's ou LC's de forma simultânea, libertando o seu PC para outros trabalhos. A memória RAM da interface protege os dados de falhas do computador ou reboots.

2. O Módulo Series 600 LINK permite duas vias de comunicação digital entre o PC e o GC suportado, dando ao utilizador um método simples e totalmente integrado para o controlo do instrumento e aquisição de dados. LINK permite o controlo total do processo cromatográfico a partir de um simples ponto.

3. O Módulo Interface de validação Series 500 e o software de acompanhamento permite ao utilizador testar cada interface do seu laboratório para linearidade, ganho, e erro de ganho, assegurando a integridade da conversão e conformidade com as GLP.

4. TurboChrom 3 deixa-lhe o caminho aberto para o futuro do seu laboratório, adici-

onando mais GC's e LC's, networking - todos os caminhos para SQL*LIMS.

5. PE Nelson mantém a reputação standard em tratamento de dados de cromatografia, desenhando o TurboChrom 3 para correr em ambiente Microsoft Windows 3.1.

Mantenha o seu laboratório na frente. Tire vantagem de todo o poder do seu PC. Kick no Turbo.

Contacto:
Instrumentos de Laboratório e Científicos, Lda.
R. Dr. Álvaro de Castro, 77
1600 LISBOA
Tel: 796 321 72
Fax: 7943 70 35
Tlx: 60 245 ILC P

LiChroGraph Detector Diode Array L-4500 da Merck-Hitachi



O Diode Array L-4500, abre uma nova dimensão na análise por HPLC. É o primeiro detector a utilizar um prisma para a dispersão da luz, o que se traduz na mais elevada resolução espectral, permitindo obter um ótimo espectro mesmo a valores de absorção na ordem de 10^{-3} unidades.

Possui um software altamente competente e versátil, rápido e fácil de utilizar, adequado em Controlo de Qualidade e Investigação.

O L-4500 dispõe de todos os requisitos necessários para permitir uma análise e documentação de resultados de acordo com "Good laboratory Practices" (GLP), como por exemplo, elevada sensibilidade, controlo de pureza de pico, simples manuseamento do software, livreria de espectros, relatório de conformidade do sistema, controlo de todo o sistema cromatográfico, etc.. Permite ainda o tratamento de dados de um segundo sector.

Contacto:
Merck Portuguesa, Lda.
Rua Alfredo da Silva, 3C
1300 LISBOA
Tel: 362 14 34
Fax: 362 14 45

BROOKHAVEN INSTRUMENTS ZETA PLUS Potencial ZETA e Análise de Tamanho de Partículas



Com um inovador desenho de célula de medida descartável. Computador baseado em 80386 incorporado.

Aplicações: Clarificação, filtração, separação e análise de estabilidade de dispersões em meio aquoso e outros solventes polares.

Este aparelho faz parte de uma gama completa de instrumentos para análise do tamanho de partículas por dispersão de luz ou centrifugação com detecção óptica ou de raios X, cobrindo no total, a gama de 0.002 micron (emulsões com dispersão de luz laser) a 100 micron (óxidos metálicos com centrifugação e detecção por raios X).

Contacto:
Biodinâmica - Bionica Aplicada, Lda.
Rua da Guiné, 2.º Esq.
1100 LISBOA
Tel: (01) 815 07 60
Fax: (01) 815 07 70

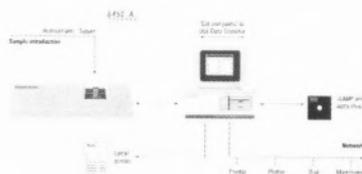
BALANÇAS "METTLER"

Simples e Económicas. A feliz coincidência de numerosos factores favoráveis.

SÉRIES AB, PB e SB



**HP 8452 WIN DIODO ARRAY.
ESPECTROFOTÓMETRO DE UV/VIS**



Para investigação, desenvolvimento de métodos e controlo de qualidade. Validação e GLP.

Contacto:
SOQUÍMICA, Sociedade de Representações de Química, Lda.
R. Coronel Santos Pedroso, 15
1500 LISBOA
Tel: 716 51 60 - Telefax: 716 51 69

**ESPECTROFOTÓMETRO
DE ABSORÇÃO ATÓMICA
939 QZ-ZEEMAN**

Este sistema é dedicado aos trabalhos em câmara de grafite e o único que lhe oferece

a escolha do tipo de correcção do background que deseja: ZEEMAN OU LÂMPADA DE DEUTÉRIO.

A alta performance está garantida pelo desenho da óptica de alta energia, campo magnético de alta potência modulado, controlo de temperatura por fibra óptica, entre outras características adicionais.

Os tubos de grafite E.L.C., têm uma vida útil superior a 2000 GLC, diagnósticos, análises multi-elemento e exportação de dados para a folha de cálculo "Excel".

Registado na norma ISO 9000.

Para rotina ou investigação, a última geração em câmara de grafite.

**ESPECTROFOTÓMETRO
DE ABSORÇÃO ATÓMICA
SOLAAR 929**

A UNICAM com mais de 30 anos de experiência na área de absorção atómica, tem a solução para laboratórios com baixo orçamento:

O NOVO SOLAAR 929



Controlado por microprocessador ou computador a escolha, pode acoplar um motor automático.

A Câmara de Nebulização é totalmente inerte, e admite amostras com alta concentração.

O software, em ambiente windows microsoft, pode acoplar a câmara de grafite.

Registado na norma ISO 9000.

Contacto:
UNICAM
Sede:
Rua Actriz Adelina Fernandes, Ll. 13 A/B 2795 LINDA-A-VELHA - PORTUGAL
Tels: (01) 414 03 25-414 03 41
Fax: (01) 414 03 57

Acordo ICD/SPQ

Computadores TOPIS

Preços de Estudante, extensível aos sócios da Sociedade Portuguesa de Química

Loja das Secções da Associação de Estudantes do IST - 8489323

Loja de Informática da Associação de Estudantes do ISCTE - 7935333

Análise do Programa Spec20

J. P. LEAL*

M. J. MATOS**

O **Spec20** proporciona uma simulação interactiva de um espectrofotómetro manual típico, o Spectronic 20[®] da *Bausch and Lomb*. A semelhança entre a simulação e o aparelho real permite adquirir rapidamente um enorme à-vontade na execução das experiências. O ecrã apresenta uma cópia fidedigna do aparelho (com efeito tridimensional), bem como todos os botões de controle e o mostrador de medida de transmitâncias (fig. 1). O programa apresenta ainda a possibilidade de recolher e analisar os dados ou de os representar graficamente.

Todos os ensaios são realizados sobre a reprodução do aparelho no ecrã do computador manipulando os tubos das amostras e os botões do aparelho através do rato ou do teclado. Em ambos os casos é bastante fácil a operação pois apenas as operações que podem ser usadas em determinada altura se apresentam activas (os botões activos mostram um aspecto tridimensional e os não activos aparecem a cinzento.) Quando da utilização do teclado as operações são acedidas através da primeira letra da acção a realizar inscrita no respectivo botão e que apresenta uma cor diferente do restante texto.

A reprodução do aparelho real é bastante boa observando-se inclusive a oscilação característica do ponteiro quando o aparelho é ligado. Tenta-se também representar a cor aproximada das soluções em análise e inclusive a reflexão da luz no tubo da amostra.

No início do programa é apresentada uma pequena demonstração da manipulação dos tubos das amostras mostrando a limpeza do tubo, o alinhamento e inserção no porta-amostras.



O objectivo do programa (familiarizar o utilizador com a operação de um espectrofotómetro) é conseguido propondo que se determine a concentração de uma solução de concentração desconhecida. Para atingir essa meta, devem ser seguidos os seguintes passos:

— ligar o aparelho (rodando o botão ON/OFF que também controla o acerto da transmitância) e esperar que ele aqueça;

— seleccionar de entre as várias soluções existentes com qual quer trabalhar e escolher a concentração a usar. A partir desta concentração o programa disponibiliza, além da concentração original, mais três tubos com as concentrações 1/8, 1/4 e 1/2 da original (inicialmente estão disponíveis soluções de seis compostos, mas o utilizador pode introduzir novos compostos);

— após o aquecimento, acertar o zero da transmitância quando a luz não passa, fechando o compartimento da amostra e rodando para tal o botão de acerto — botão de ON/OFF (esta operação deverá ser feita sem tubo de amostra no respectivo compartimento pois tal como no aparelho real a fonte de luz é automaticamente desligada quando não está inserido nenhum tubo de amostra);

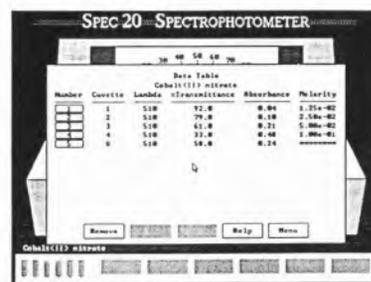
— rodando o botão da selecção do comprimento de onda procurar o que corresponde a um máximo de absorção para a substância em estudo (o programa sugere um comprimento de onda, por exemplo 510 nm para o nitrato de cobalto, mas o utilizador pode escolher outro qualquer);

— colocar o tubo com o "branco" tendo o cuidado de o limpar e de o alinhar antes de o introduzir no compartimento de leitura;

— Introduzir o tubo no compartimento e fechar este;

— acertar a escala para 100% de transmitância;

— após estes acertos deve o utilizador medir a transmitância das 4 soluções de concentração conhecida e da solução cuja concentração se pretende determinar não se esquecendo de informar o programa que quer registar os valores (opção **Data**) pois só assim os



valores são registados para posterior tratamento gráfico.

Os dados recolhidos podem ser consultados (fig. 2) e usados para se obterem vários tipos de gráficos. As opções disponíveis são:

— Tabela de Dados

— Transmitância vs. comprimento de onda

— Absorvância vs. comprimento de onda

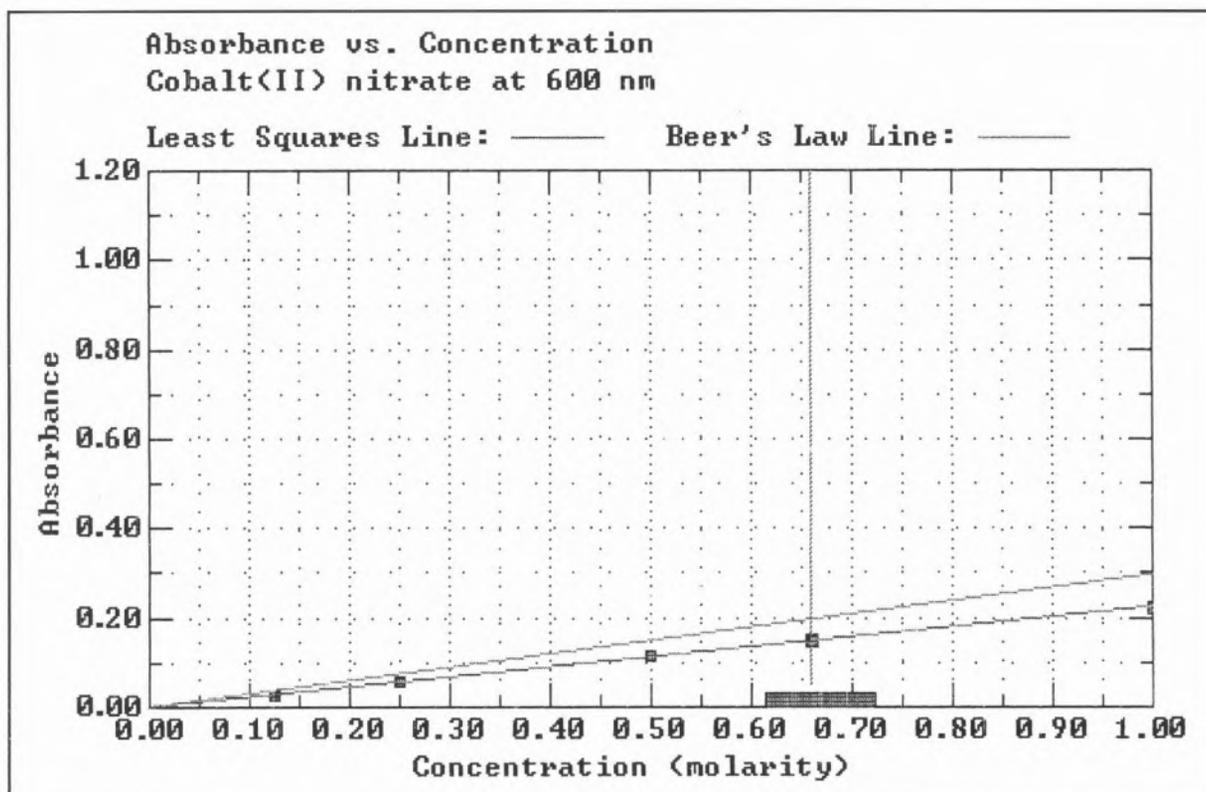
— Transmitância vs. concentração

— Absorvância vs. concentração

Neste caso o gráfico que interessa é o da absorção em função da concentração, que pela aplicação da lei de Beer nos permite calcular a concentração da solução desconhecida. O gráfico obtido (fig. 3) apresenta a recta mais provável para os pontos experimentais medidos, a recta obtida a partir da lei de Beer e o valor de concentração aceitável para a solução desconhecida.

Além deste tipo de procedimento o programa permite também a análise de uma só solução a vários comprimentos de onda. O procedimento é idêntico tendo apenas que se ir variando o comprimento de onda para uma mesma amostra e registar os respectivos valores com a opção **Data**. Um gráfico típico obtido é mostrado na figura 4.

A apreciação global deste programa é bastante favorável pela sua fidelidade ao aparelho real tanto em representação gráfica como em comportamento. No comportamento em relação ao modelo real notámos apenas uma diferença que consiste no alinhamento do tubo. No programa o alinhamento faz-se antes de introduzir o tubo e na realidade faz-se com o tubo já inserido no porta-amostras e acertando o traço deste com o



existente no tubo.

Sendo o simulador de um aparelho real pode encarar-se sob duas perspectivas:

- representar apenas o aparelho real,
- representar o aparelho real com alguma inteligência artificial.

Sob a primeira perspectiva este aparelho é excelente como já dissemos. Sob a segunda pensamos que se poderia ter ido um pouco mais longe em termos de interacção com o utilizador que é geralmente um estudante ou técnico de laboratório. Entre outras sugestões pensamos que o aparelho deveria informar o utilizador quando o tubo não tivesse sido limpo ou alinhado. O programa não permite que os valores recolhidos sejam impressos pois mesmo a cópia de écran através da tecla de *Print Screen* é inibida para qualquer imagem. Os pontos tam-

bém não podem ser guardados em ficheiro. As escalas dos gráficos são sempre feitas automaticamente o que nem sempre conduz aos melhores resultados, e as linhas que no écran se conseguem distinguir com facilidade umas das outras são impressas de modo dificilmente distinguível.

Recomendamos o programa para o treino de utilização de espectrofotómetros quando estes não existam ou para uma utilização prévia do programa antes da utilização do aparelho real (o programa não se estraga...). O programa pode ser facilmente usado por estudantes universitários dos primeiros anos ou por técnicos de laboratório experimentados neste tipo de técnicas.

Quaisquer questões poderão ser enviadas para a sede da SPQ ao cuidado dos autores desta análise. O programa *Spec20* foi adquirido pela SPQ, e está à disposição dos sócios que o pretendam consultar antes de o adquirir.

Necessidades de Hardware

IBM PC ou compatível com placa EGA ou VGA (recomenda-se um écran policromático para aproveitar o belo efeito visual da simulação). Necessita apenas uma drive de baixa densidade (5" 1/4 ou 3" 1/2), embora um disco rígido facilite as operações em termos de velocidade. Um rato é prático, embora não seja fundamental. Imprime em impressoras compatíveis com Epson, IBM ou Hewlett-Packard (praticamente todas as impressoras são compatíveis com pelo menos um destes modos).

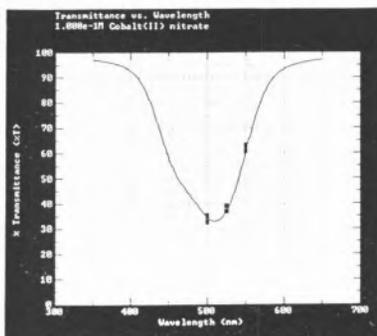
Fornecedor:

Journal of Chemical Education: Software, Department of Chemistry, University of Wisconsin-Madison, Madison, WI 53706 USA.

Preço:

70 dólares (1993), incluindo também o programa Notebook.

*Dep. Química, ICEN-INETI, Sacavém.
**Dep. Química, ISEL
(Instituto Superior de Engenharia de Lisboa).



A nossa classificação:

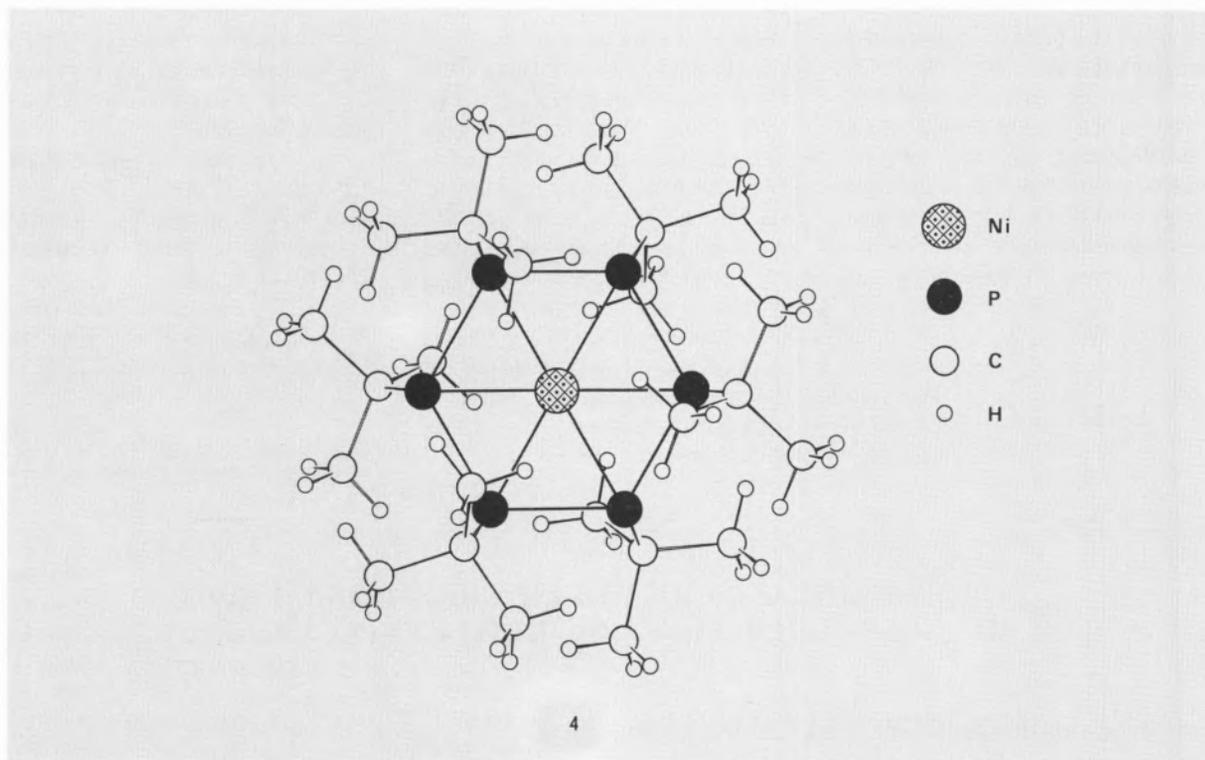
Cálculo	—
Gráficos	5
Interacção com o utilizador	4
Impressão	4
Manual	4

1- Mau, 2 - Sofrível, 3 - Razoável, 4 - Bom, 5 - Muito bom

[Ni(P-*t*-Bu)₆]

Uma curiosa molécula do ponto de vista estrutural!

M. J. CALHORDA*



Como é do conhecimento mais ou menos geral, a estrutura habitual para um complexo de número de coordenação 6, que se pode representar por ML_6 , onde M designa o elemento central e L o ligando a ele coordenado, é tradicionalmente a octaédrica, **1**. Com o andar dos tempos e o aumento do número de compostos sintetizados, a estrutura de prisma trigonal, **2**, foi-se tornando cada vez mais frequente, em particular quando os ligandos L são bidentados, ou seja, quando se coordenam por dois átomos da mesma molécula, e o metal tem uma configuração electrónica que não privilegia a geometria octaédrica para a sua esfera de coordenação. No entanto, muitos químicos apres-

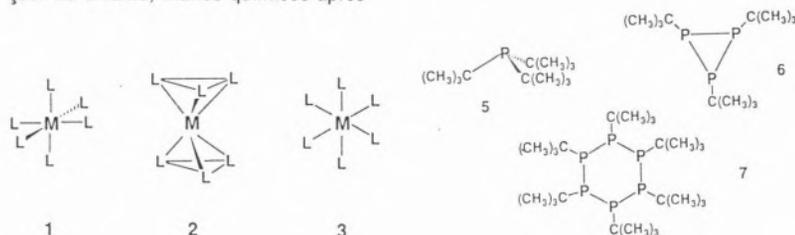
sados, ao representar a sua estrutura dum complexo octaédrico, não desenhavam algo parecido com **1**, mas sim aquilo que à primeira vista pareceria uma geometria hexagonal plana, **3**.

Algum problema? Confiando nas ideias feitas sobre representação química, o autor de tal versão (**3**) pensaria que o seu desenho teria que representar um complexo octaédrico (**1**). Pois que mais podia ser? Esta interpretação simplista foi com certeza abalada pela síntese recente dum complexo de níquel, cuja estrutura foi determinada por difracção de raios-X, **4**, tendo-se observado que os seis átomos de fósforo ligados ao

metal e o próprio níquel estão todos no mesmo plano: a estrutura é mesmo hexagonal plana!

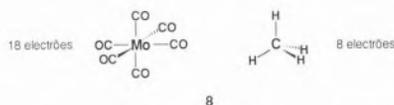
A síntese deste complexo ilustra mais um caso de *serendipity*: o químico preparativo pegou num frasco cujo rótulo indicava $P(t\text{-Bu})_3$, **5**, para fazer mais uma vez "a reacção do costume", mas na realidade o que estava no frasco era $(P-t\text{-Bu})_3$, **6**! Na presença de $NiCl_2$ anidro, o anel de três membros abriu-se e dois deles juntaram-se para fazer o novo ligando $(P-t\text{-Bu})_6$, **7**, obviamente desconhecido como ligando livre, no meio do qual se aninhou o átomo metálico, em mais um exemplo de síntese assistida.

Um olhar mais prolongado para a estrutura de **4** mostra que este agregado (relativamente estável: decompõe-se devagar em solução) se mantém porque o níquel não consegue sair do "buraco": os volumosos grupos *t*-Bu, ocupando alternadamente posições acima e abaixo do plano NiP_6 , como se vê em **4**, dificultam a aproximação seja do que for do níquel e



não o deixam sair assim muito facilmente.

Além da sua estrutura curiosa, a primeira do seu tipo, o complexo **4** tem mais uma particularidade. Os químicos inorgânicos (e ainda mais a variante dos químicos organometálicos) gostam de contar electrões e ter compostos que obedecem à regra dos 18 electrões, numa ampliação da velha regra do octeto usada, por exemplo, para os compostos de carbono ou azoto.²¹ Casos típicos de compostos que obedecem a estas regras são, para o caso dos 18 electrões, o $\text{Mo}(\text{CO})_6$, em que o molibdénio está num estado de oxidação formal 0, tendo seis electrões de valência e recebendo mais dois por cada grupo carbonilo, CO, e o CH_4 , em que o carbono "tem" oito electrões: os seus quatro e os quatro do hidrogénio, **8**.



No caso do complexo $[\text{Ni}(\text{P}-t\text{-Bu})_6]$, se se fizerem as contas, conclui-se que o ligando é neutro e o complexo também, o que obriga o níquel a ser formalmente $\text{Ni}(0)$ e a ter uma configuração electrónica de valência d^8 . Com efeito, cada átomo de fósforo coordenado liga-se a dois fósforos, os seus vizinhos no anel de seis membros, e ao carbono terciário do grupo $t\text{-Bu}$, ou seja é semelhante ao átomo de fósforo numa bem comportada fosfina PR_3 , neutra, bem conhecida como doadora de dois electrões. Então o níquel tem à sua volta nada menos do que $10 + 6 \times 2 = 22$ electrões! Claro que alguém tentou interpretar estes resultados, fazendo cálculos teóricos e estudando mais umas coisas. Para os interessados recomenda-se a leitura dos artigos originais, refs. 2 e 4, e para todos aconselha-se a ter prudência nos desenhos quando quiserem representar estruturas correspondentes a um número de coordenação 6.

BIBLIOGRAFIA

1. R. Hoffmann, P. Laszlo, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **30** (1991) 1.
2. R. Ahlrichs, D. Fenster, H. Oesen, W. Schneider, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **31** (1992) 323.
3. O termo tem sido usado, em inglês, para descrever descobertas inesperadas obtidas por acaso. Para mais informações sobre a sua origem e ocorrência ver, por exemplo, R. M. Roberts *Serendipity - Accidental Discoveries in Science*, Wiley, NY, 1989.
4. K. Dehnicke, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **31** (1992) 424.
5. K. E. Purcell e J. C. Kotz, *Inorganic Chemistry*, Holt Saunders Int. Ed., Philadelphia, 1977.
6. R. L. Dekock e H. B. Gray, *Chemical Structure and Bonding*, Benjamin/Cummings, London, 1980.

* IST.

CROMATÓGRAFO LÍQUIDO-LÍQUIDO MODELO 1050 DA NOSSA REPRESENTADA «HEWLETT-PACKARD»

Produtos de Qualidade para Cromatografia Líquida Detector de Diodo Array com HPLC ^{3D} Chemstation

- Detecção sensível independente das circunstâncias
- Recolha de células
- Espectros de alta resolução mesmo para baixas absorvâncias
- Resultados fiáveis para registos GLP
- Acesso a matrix 3-D
- Confirmação de pureza durante a análise
- Controlo individual HP que garante a conformidade de cada detector com as especificações



A Química é divertida!*

No último *Química* chamou-se a atenção para três monografias do ICE (Institute for Chemical Education, Department of Chemistry, University of Wisconsin-Madison, 1101 University Avenue, Madison, WI 53706-1396, EUA) e prometeu-se que agora se faria de outras publicações e de material de demonstração produzido e comercializado por aquele instituto.

Uma dessas publicações é o *Chem Camp Handbook* — um guia concebido para conduzir crianças dos 11 aos 14 anos nas actividades experimentais da Química. O *Chem Camp Handbook* integra-se num programa chamado *Fun with Chemistry*, e prevê cinco sessões de 3 horas e um quarto ao longo de cinco dias, não necessariamente consecutivos. Cada sessão trata de um tópico (Elementos, Ácidos e Bases, Corrosão e Análise, Metais e Ligas, e Crescimento de Cristais e Polímeros) e envolve um período de trabalho no laboratório e dois períodos de discussão, antes e após a execução das experiências pelos participantes. Como o nome indica, o *Chem Camp Handbook* é um verdadeiro manual, contendo não só os detalhes de todas as experiências a realizar, como os tópicos para as discussões, listas de equipamento e reagentes necessários de segurança, sugestões para a organização do laboratório, etc.

Outra publicação do ICE, no âmbito do programa *Fun with Chemistry (A Guidebook of K-12 Activities)*, é uma colectânea de cerca de 50 experiências e demonstrações, "seleccionadas com base em critérios como a segurança, a simplicidade, o baixo custo e o valor pedagógico". Cada uma

das actividades é descrita detalhadamente e inclui recomendações dos níveis etários a que é dirigida, precauções na execução, duração, etc.. Um dos apêndices é uma lista dos reagentes que se podem adquirir em locais como supermercados, lojas de fotografia ou drogas (são dados os nomes químicos e os nomes comuns). As experiências são organizadas de forma a que seja fácil descobrir as que mais se adequam para um determinado fim. Por exemplo, existem três actividades envolvendo polímeros, sete sobre mudanças de fase e cinco sobre alimentação (como é óbvio, muitas das actividades prestam-se a ilustrar diferentes tópicos). O manual está dividido em duas partes. Na primeira agrupam-se as experiências mais elementares e a segunda é dirigida a estudantes mais avançados.

A terceira publicação do ICE (*Hands-On Activities: Student Handouts*), ainda dentro do programa *Fun with Chemistry*, é uma colecção de 10 experiências científicas que qualquer pessoa pode fazer em casa (exemplos: uma lata de alumínio que é esmagada por acção da pressão atmosférica, um balão à prova de fogo, bolhas de sabão que flutuam). Os textos são acompanhados por um elástico e por um disco metálico do tamanho de uma moeda de vinte escudos. O elástico é utilizado para ilustrar conceitos como calor e entropia. A experiência do disco metálico proporciona momentos bem divertidos, como pude comprovar numa aula de Termodinâmica no IST. O disco, ligeiramente abaulado, é constituído por duas rodela de metais diferentes, coladas uma à outra. Estes dois metais têm coeficientes de dilatação diferentes,



de forma que, friccionando o disco com os dedos e comprimindo-o, inverte-se a concavidade. Quando o disco arrefece, em contacto com a superfície de uma mesa, retorna à sua configuração mais estável à temperatura ambiente, dando um grande salto. Se o aquecimento do disco for feito sem que a audiência se aperceba (o que é simples), a experiência pode servir, por exemplo, para ilustrar uma violação aparente — e espectacular — à 2ª lei da Termodinâmica!

Duas outras actividades propostas e comercializadas pelo ICE são o "metal com memória" e um *kit* para se explicar a difracção de radiação em redes cristalinas. A primeira consiste num fio de Nitinol (uma liga de níquel e titânio), previamente submetido a um tratamento térmico, com a forma as letras ICE. A experiência consiste em "estragar" a forma inicial, por exemplo esticando totalmente o fio, e em seguida colocá-lo num banho de água a mais de 80 °C. As letras ICE reaparecem imediatamente. A segunda actividade é mais sofisticada: com o auxílio de um pequeno laser (por exemplo dos que se usam como apontadores em conferências) e de um slide contendo vários padrões geométricos (que simulam estruturas cristalinas) é possível projectar num ecrã as imagens de difracção da radiação provocada por cada um desses padrões e obter infor-

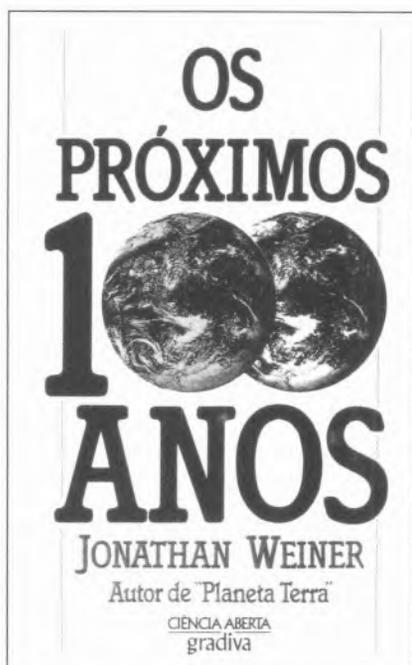
mação qualitativa e quantitativa sobre cada um deles. A experiência, que se baseia na analogia entre as difracções de Bragg e de Fraunhofer, é um excelente meio para ilustrar alguns conceitos que normalmente são de difícil apreensão pelos alunos e que raramente são complementados por trabalho experimental num curso universitário. No mínimo, a experiência serve para salientar algumas das técnicas mais importantes que os Químicos dispõem para obter informações sobre a estrutura cristalina e molecular.

Em resumo, as actividades aqui referidas, propostas pelo ICE, são auxiliares valiosos para o ensino da Química a vários níveis, pelo que não tenho dúvidas em recomendar a sua aquisição. Todo o material está disponível para consulta dos sócios da SPQ (para já, apenas na Sede, em Lisboa).

J.A. Martinho Simões
FCUL

* *Chem Camp Handbook*, ICE Publication 91-007 (\$25)
Fun with Chemistry: A Guidebook of K-12 Activities, Volume 1, ICE Publication 91-005 (\$19.5)
Hands-On Activities: Student Handouts, ICE Publication 91-008 (10 conjuntos \$ 15)
Memory Metal, ICE Publication 91-011 (\$12)
Optical Transform Kit, ICE Publication 90-002 (\$6; \$115 com laser)

Os próximos 100 anos*



"Os próximos 100 anos" é o título sugestivo do livro de Jonathan Weiner, na edição portuguesa da Gradiva. Trata-se de uma obra bem escrita e bem traduzida deste excepcional divulgador, celebrizado pela adaptação televisiva que foi feita ao seu livro "Planeta Terra", uma das séries de maior êxito no domínio da abordagem das geociências levadas a cabo pela RTP, só comparável a outra que fez história, "Cosmos", de Carl Sagan.

"Os próximos 100 anos", reflectem e transmitem uma preocupação séria pelos problemas ambientais onde, entre outros, figuram a extinção das espécies, a situação dramática das florestas húmidas, o "buraco do ozono", o dióxido de carbono, o aquecimento global, os resíduos radioactivos, etc. O alerta que nos deixa antecipa-se às recomendações da Conferência do Rio de Janeiro, conhecida por "ECO 92", com o peso de, como se diz na contracapa, ser uma profecia desencantada. Os avisos que Weiner nos deixa

na edição original, em 1990, eram e são realistas. São preocupações para encarar a sério e com coragem. Não há ali alarmismo, há sim a noção exacta dos problemas ambientais que a ciência nos permite inferir. E Weiner tem capacidade científica e qualidade pedagógica para o fazer.

Numa época dominada pelo tecnicismo, onde domina a sociedade industrial, desenvolvimentista, tantas vezes desumanizada e alheia da condição natural do Homem no todo global que é o nosso Planeta ainda azul, em que a política desenfreada de produção de bens por parte de grupos económicos restritos tem como consequência, para além do desenvolvimento (discutível), a distribuição gratuita, generalizada por toda a Terra, dos efeitos nocivos dessa produção, na maioria das vezes poluente. Vejam-se as chuvas ácidas, os efluentes industriais e urbanos lançados nas águas dos rios e dos oceanos, etc.

É papel dos cientistas e dos pedagogos levar o cida-

dão comum a tomar consciência destes problemas, inculcando nele o interesse por este tipo de conhecimento e despertá-lo da alienação a que a vertigem do dia-a-dia o acorrenta.

Impõe-se, por outro lado, fomentar uma verdadeira cultura científica, também nas classes habitualmente tidas por cultas, talvez ricas de saber no domínio das artes, das letras ou das leis, mas que salvo excepções, andam muito afastadas do saber científico. Sendo destas classes que normalmente saem os detentores do poder político-económico, a sua sensibilidade para os problemas culturais e científicos não é de molde a perspectivar melhor futuro para a saúde do Planeta. Todos constatamos no quotidiano como são hipócritas, tantas vezes, as políticas de ambiente aos mais diversos níveis da vida das comunidades.

Só consciente das reais implicações do desenvolvimento no ambiente, o cidadão poderá intervir eficazmente na defesa da Natureza e na dos seus interesses fundamentais como elemento integrante dessa mesma Natureza ao lado de todos os seus pares na chamada Biodiversidade. Igualmente, devidamente habilitados ao nível de uma formação científica de base imprescindível, os tecnocratas, os gestores, os juristas ou os políticos poderão agir no respeito pelo todo natural.

Nos dias em que vivemos, "Pós-ECO 92", em que se prepara a chamada "Agenda 21" com que se procura encontrar as regras de convivência universal, no respeito pela Natureza, "Os Próximos 100 Anos" retoma toda a actualidade. Nos próximos cem anos estão conti-

das as nossas vidas e as dos nossos filhos e netos. Pese embora o dever que temos de acautelar o futuro sem limite temporal, o que fazemos, de facto, ao nível da razão, como criaturas conscientes e civilizadas que nos assumimos no topo da escala da Criação, sabemos, ou melhor, sentimos que nos próximos cem anos cabem as nossas próprias vidas e as dos nossos filhos e netos, jogam as emoções e os afectos.

Quando se observa uma imagem fotográfica da Terra vista do espaço, sabemos que nessa pequena bola azul, parcialmente envolta nos brancos farrapos das nuvens, reside tudo o que temos, a água e o ar que nos permitem a vida, o chão que pisamos e nos alimenta. É, como diz o autor, "com isso que temos de viver", e só com isso.

É pois fundamental, que os elementos do tecido social mais habilitados nesta temática, isto é, repetimos, os cientistas e os pedagogos venham a terreiro com a sua contribuição eficaz na defesa desta causa comum, tendo em vista os interesses de todos e a integridade do sistema global, esclarecendo e apoiando os seus concidadãos na reivindicação do direito a uma vida saudável e produtiva em harmonia com a Natureza, como aliás, se afirma no primeiro princípio da Declaração do Rio.

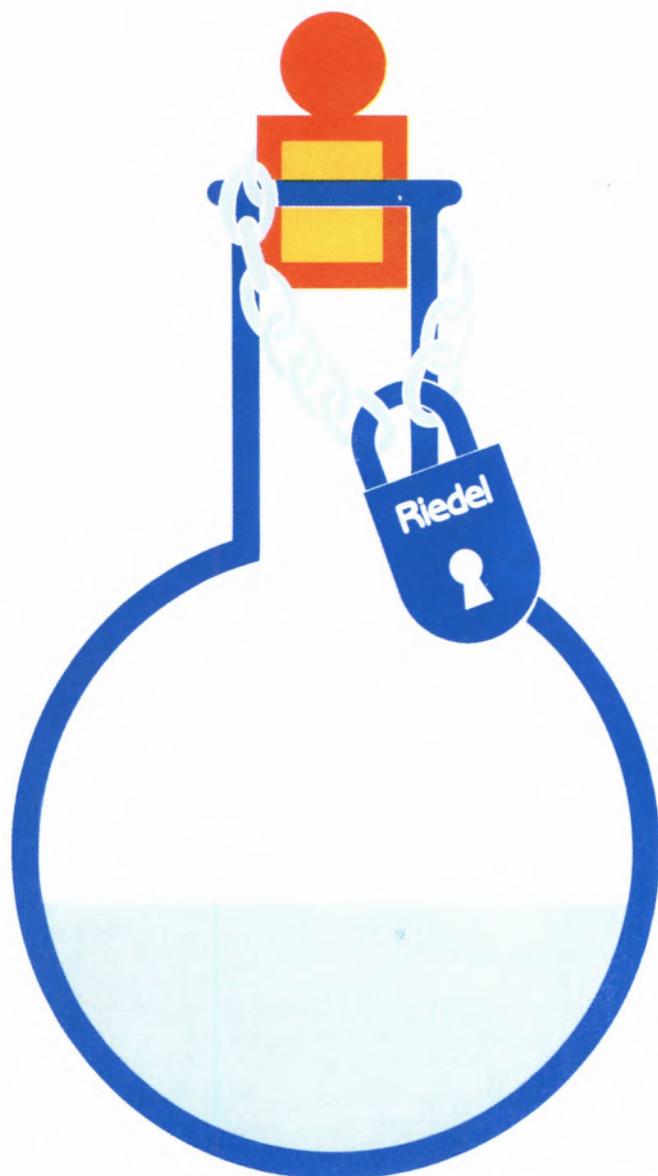
É isso que faz, no jeito que lhe é peculiar, Jonathan Weiner, em "Os próximos cem anos".

A. Galopim de Carvalho
FCUL

* Os próximos 100 anos, por J. Weiner, Gradiva, 1991.



GARANTIA DA MAIS ALTA QUALIDADE EUROPEIA



DETENTORA
DOS
CERTIFICADOS
DE
SISTEMA DE QUALIDADE

REGISTO DQS 39 509

QUE SATISFAZ ÀS
EXIGÊNCIAS DAS NORMAS

ISO 9 001
DIN ISO 9 001
EN 29 000

NO QUE REFERE A

- APRESENTAÇÃO
- PRODUÇÃO
- MONTAGEM
- ASSISTÊNCIA A CLIENTES

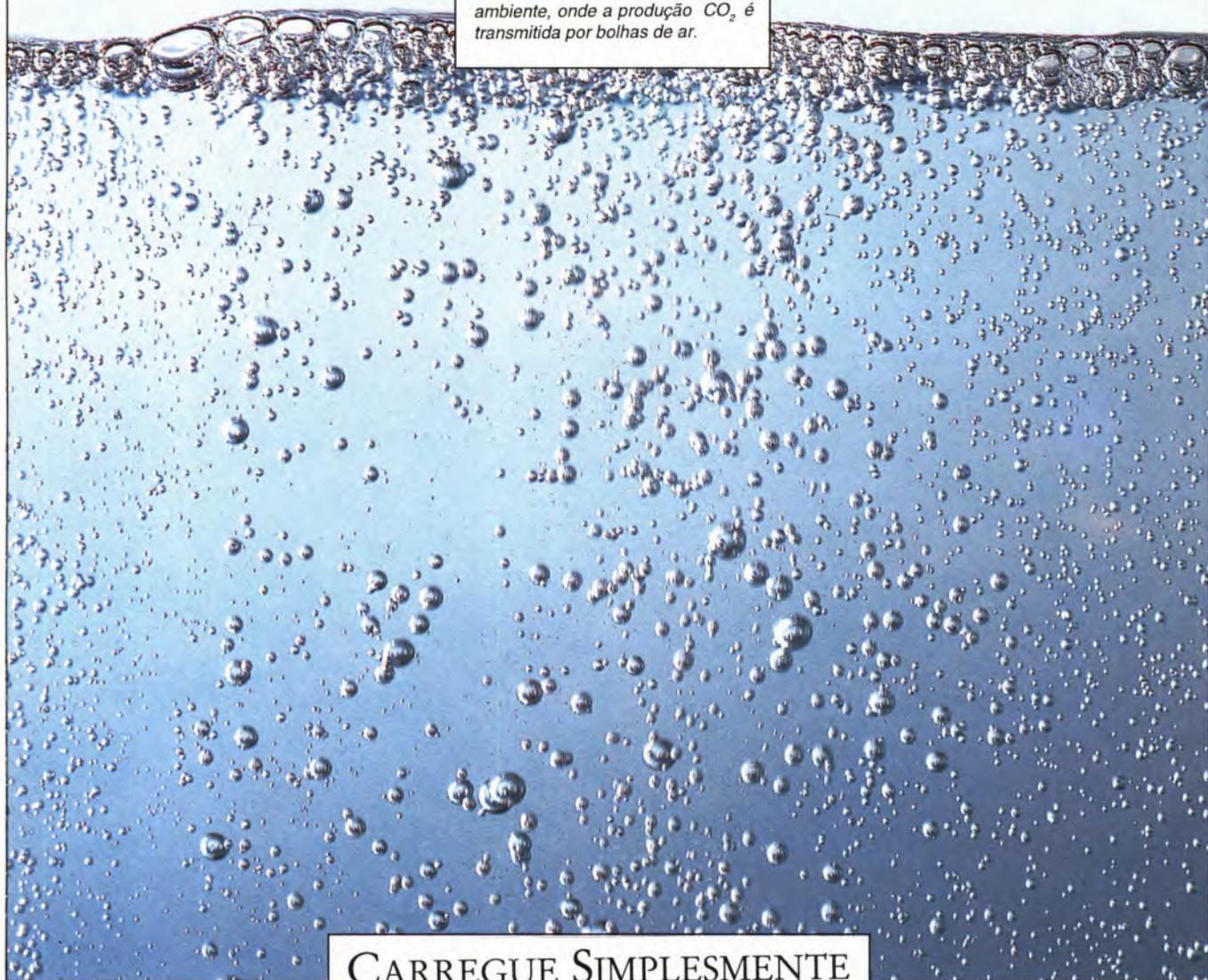


JOSÉ MANUEL GOMES DOS SANTOS, LDA.

REAGENTES PARA ANÁLISE E USO CIENTÍFICOS • MAT. LABORATÓRIO

APARTADO 23 - 2676 ODIVELAS CODEX - TEL. 937 49 38 - 937 41 22 - FAX 937 74 26

Novidade SHIMADZU: Determinação de carbono inorgânico através da injeção de uma solução de reacção de ácido-fosfórico à temperatura ambiente, onde a produção CO_2 é transmitida por bolhas de ar.



CARREGUE SIMPLEMENTE NUM BOTÃO PARA AVALIAR AUTOMÁTICAMENTE A QUALIDADE DA SUA ÁGUA

SHIMADZU TOC-5000/5050. Para uma ultra precisa análise de água purificada.

A oxidação catalítica de compostos orgânicos a sómente 680°C de temperatura bem como a decomposição de carbono inorgânico à temperatura ambiente com solução de ácido-fosfórico no TOC-5000/5050 permite determinações precisas de carbono total, carbono inorgânico, carbono orgânico total - (carbono total - carbono inorgânico) e NPOC.

TOC-5000/5050 apresenta características notáveis, como por exemplo: Ignição automática para determinação de NPOC • Determinação de CO_2 através do detector NDIR • Medidas de alcance desde os 4 ppb até 4000 ppm/TOC-5000 (50 ppb até 4000 ppm/TOC-5050) • Injeção automática através de uma micro seringa incorporada

no sistema • Software apropriado para operação automática • Monitor LCD para leitura de picos • Fácil transporte.

Se está à procura de algo compacto, inteligente, flexível, ultra-preciso e seguro para todas as aplicações em análises de água purificada ou extremamente poluída, não procure mais, o TOC-5000/5050 é a solução.

Para mais informações escreva-nos ou telefone, enviaremos informação mais detalhada imediatamente.



 **SHIMADZU**

 IZASA

IZASA PORTUGAL - Distribuições Técnicas Lda.
Av. Ventura Terra, 15 - 1.º - Tel: (01) 757 07 40
Fax: (01) 759 95 29 - 1600 Lisboa