

QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA
Publicação trimestral

Julho - Setembro 2003 **90**



ENTREVISTA:
PROF. LUÍS SOUSA LOBO

OS POLIOXOMETALATOS

ROALD HOFFMANN:
QUÍMICO E POETA

Um livro teórico para as aulas práticas

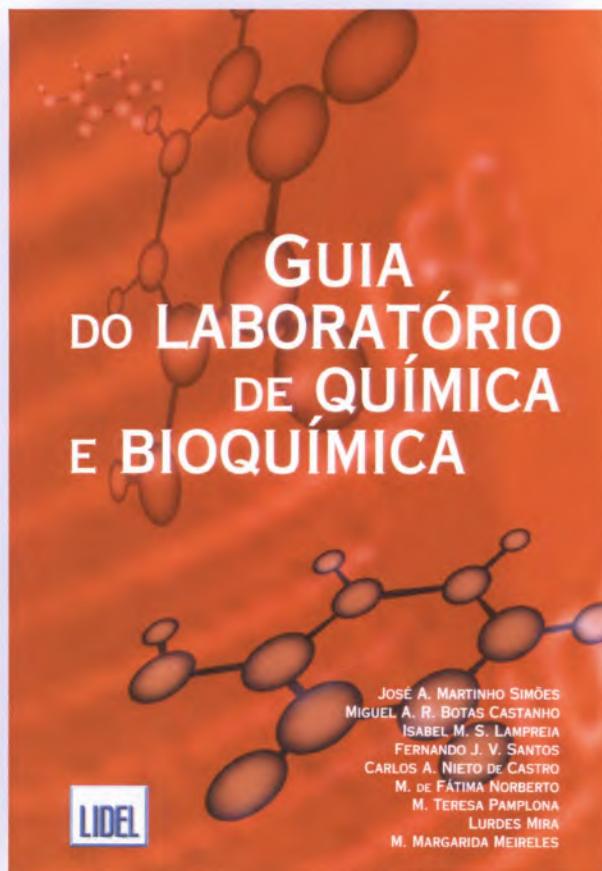
Porque é que este livro é único?

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

Porque chama a atenção para o problema da segurança nos laboratórios

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

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



P.V.P.: 2 200\$

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

Autores

- José A. Martinho Simões
- Miguel A. R. Botas Castanho
- Isabel M. S. Lampreia
- Fernando J. V. Santos
- Carlos A. Nieto de Castro
- M. de Fátima Norberto
- M. Teresa Pamplona
- Lurdes Mira
- M. Margarida Meireles



LIDEL - Edições Técnicas, Lda.

www.lidel.pt

e-mail: promocao@lidel.pt

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

**Boletim da
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA**



Capa: Projecto do Campus de Campolide da UNL.

Propriedade de:

Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870 – 1180
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 90, Julho – Setembro 2003

Redacção e Administração

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

Editor

Fernando Pina

Editores-Adjuntos

Jorge Gonçalves
Maria João Melo
A. Jorge Parola

Comissão Editorial

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

Colaboradores

João Paulo Leal
João Carlos Lima
Olivier Pellegrino

Publicidade

António Lopes
Marco Richter

Gráfico

sentido: designers / Nuno Gonçalves

Execução Gráfica

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

Tiragem

2500 exemplares

Preço avulso

€ 12,50 – 2.506\$00

Assinatura anual – quatro números

€ 45 – 9.022\$00

(Continente, Açores e Madeira)

Distribuição Gratuita aos sócios da SPQ

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

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

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

Publicação subsidiada pela

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

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

Editorial	2
Cartas ao Editor	2
Noticiário SPQ	3
Noticiário Geral	
Ivan Villax, 1925–2003, Fundador da Hovione	5
Actualidades Científicas	6
I Fórum da Química	8
Links Recomendados	9
Olhares Quirais	
No Jardim com Roald Hoffmann: Químico e Poeta <i>Christopher Damien Aurette</i>	11
Ex-Libris	
Theory and Interpretation of Fluorescence and Phosphorescence – Ralph S. Becker <i>Fernando Pina</i>	19
Entrevista	
Prof. Luís Sousa Lobo	21
Artigos	
Conversão de NO e N ₂ O usando misturas binárias de cobre suportadas em carvão activado <i>Sónia A. Carabineiro, Joaquim S. Vital, Ana M. Ramos, Francisco B. Fernandes, Isabel F. Fonseca</i>	33
Cinquentenário da Simulação Computacional em Mecânica Estatística <i>Fernando M. S. Silva Fernandes</i>	39
Os Polioxometalatos. Do Anião de Keggin às Nanocápsulas <i>José Gamelas, Ana Cavaleiro, Isabel Santos, Maria S. Balula</i>	45
Sublimação Inversa, o que é isso? <i>Isabel Morgado Leal, João Paulo Leal</i>	53
Química e Sociedade	
Memória familiar e geográfica do químico Ferreira da Silva <i>Eduardo Tomás Alves</i>	55
Actividades no laboratório	
Síntese e caracterização de pigmentos, um projecto laboratorial de Química na Arte <i>Teodora Ferreira, Raquel Cristovão e António E. Candeias</i>	61
Actividades na sala de aula	64a
Química e Ensino	
Estudo sobre "Quantidade de substância" e Mole <i>Ana F. P. Abrantes, Catarina S. G. Vieira e M. Fernanda P. Silva</i>	65
A Internet no desvendar da ciência em casa <i>Vasco Sérgio Correia Freitas Silva</i>	69

Se nós soubessemos adivinhar o futuro seria fácil. Se o Supremo Arquitecto se dignasse dirigir-nos a palavra informando-nos que, por exemplo, a Ciência iria ser substituída pela astrologia, então nada restaria aos Governos que fechar, pelo menos, a maioria dos cursos de Ciências e desde já preparar umas boas licenciaturas em astrologia. Se também uma varinha mágica nos revelasse, após toque subtil na "tólinha", que a Química e a Biologia deixariam de servir para interpretar tantos fenómenos da vida do dia-a-dia e da própria vida, então seria justo fechar esses cursos. O problema é que felizmente há o livre arbítrio. O indivíduo faz aquilo que quer, ou pelo menos sempre pode tentar, e a natureza é tão complexa que deixa quase sempre muito mal vistas as pessoas que a querem espartilhar em teorias de comportamento. Como se costuma dizer, com todos os dados, qualquer um toma uma boa decisão; com poucos dados, só um bom gestor; e sem dados nenhuns só um gestor de excepção. Não

sabemos se será uma boa política impedir que pessoas com vocações para certas ciências, as não possam seguir porque os cursos estão fechados, ou o número clausus é muito baixo. O que acontece em Portugal com a Medicina é exemplo dos resultados desta política. A questão é muito complexa, e não pretendemos dar-lhe resposta. Mas no caso da Química, creio que estamos numa situação em que há os dados todos e qualquer um pode decidir que ensinar Química, faz falta e faz bem às pessoas e às sociedades. Errar nesta matéria vai ter custos no desenvolvimento económico, na cultura dos cidadãos, que olham a Química como um papão, e nos próprios direitos de cidadania. Dizia um anúncio na TV italiana, este presunto não é Químico. Mas o facto é que o é. E todos os produtos biológicos são pura Química em acção (incluindo aqui a Bioquímica evidentemente). E se nós temos medo da Química, se não a percebemos, qualquer fazedor de opinião pode levar largas massas de cidadãos a

seguir o partido da ignorância e do obscurantismo. Uma pergunta só para provocar (de vez em quando o editor também tem direito à indignação): Que é feito dos resíduos tóxicos? Continuam a envenenar os solos e as águas que os nossos filhos e nós próprios iremos usar? E onde estão os tais críticos da co-incineração? Ainda protestam por este lamentável estado de coisas? ...bom ... é que agora este assunto não está na montra e não dá dividendos de notoriedade.

Acabemos com uma nota de optimismo. A nossa SPQ e os seus associados continuam a trabalhar com amor. Há muita gente como o Prof. Sousa Lobo, o nosso entrevistado, que não baixam os braços. Este número tem coisas interessantes para ler, para concordar e para discordar. Porque discordar é tão importante como concordar. O que é diferente de calar e só falar quando a coisa pode trazer benefícios ao palrador.

CARTAS AO EDITOR

"Aplica-se esta fórmula"

Estamos em plena época de exames e ao corrigir para classificação, os exames escritos, vejo com desalento, ali, preto no branco, a insuficiência de conhecimentos básicos, há muito supostamente adquiridos. Com tantas e tamanhas deficiências, percebe-se que isto tenha que se reflectir naquilo a que depois se chama Insucesso, nas disciplinas da Universidade.

Estava eu a questionar-me sobre como dar a volta a isto, quando me deparo com o "FORMULÁRIO" que antecede o texto do Exame Nacional de Química – 12.º ano:

Massa molar, $M = m/n$

Massa volúmica, $\rho = m/V$

Concentração, $c = n/V$

Frequência, $v = c/\lambda$

É difícil encontrar palavras para exprimir o que senti e, certamente as que se seguem não serão as mais eficazes. Em minha modesta opinião, com este gesto, foi sancionada, ao mais alto nível, a iliteracia científica.

Chamar a isto "fórmulas" e dá-las aos alunos como instrumentos auxiliares para suprir eventuais falhas de memória, ou facilitar a intrusão mecânica de dados numa calculadora, é aceitar que a um aluno do 12.º ano de Química, pré-universitário, que é questionado sobre, por exemplo, "entropia" e "abaiamento crioscópico", não se exija que SAIBA o conceito de Massa Molar, ou as

noções de Massa volúmica, Concentração e Frequência.

Depois de um Programa exigente de Química de 12.º ano, em que todas as Unidades Didáticas se intitulam de "Progredindo no Estudo de...", depois de um 10.º ano em que a 1.ª das quatro Unidades Didáticas se intitula Quantidade em Química e em que nas restantes três, mais não se faz do que lidar com as três primeiras grandezas do formulário, pergunto-me sobre o que é suposto ter sido adquirido de conhecimento e competências. Entendo as grandezas em questão, como inerentes ao conhecimento químico mínimo, isto é, à percepção do mundo que nos rodeia, às suas características e aos fenómenos que nele ocorrem. À percepção corres-

ponde desenvolvimento intelectual, que eu vejo cada vez mais diminuído na crescente maioria dos alunos universitários. A grande riqueza do Homem é o Pensamento, a capacidade de raciocinar e isso está cada vez menos exercitada na generalidade dos alunos que leciono.

Será que a metodologia adoptada com o fornecimento deste formulário pretende

ir ao encontro dos objectivos de algum modelo educacional?

Estou certa que a opção da inclusão de tal formulário foi resultado de decisão tomada após profunda discussão em grupos profissionais competentes. A minha análise falhará, portanto, por falta dos argumentos tidos por relevantes, que desconheço, mas que mesmo

assim me conduz a discordar do produto final.

Não sei se será feito algum inquérito de opinião sobre esta questão, mas, se for, gostaria de conhecer as conclusões. É que o impacte social e económico cai sobre todos nós!

Maria Filomena Camões
Professora Associada com Agregação em
Química / FCUL

NOTICIÁRIO SPQ



Encontro Nacional
SPQ
Coimbra, 15-17 Abril 2004

XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

O XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química realizar-se-á de 15 a 17 de Abril de 2004, no Auditório da Universidade de Coimbra. Na tradição de encontros anteriores, a presente edição manterá o seu carácter interdisciplinar; no entanto, entendeu a Comis-

são Organizadora propôr um tema abrangente e unificador para este encontro: Química Macromolecular. Aos interessados solicita-se a apresentação de comunicações sobre temas fundamentais e inovadores nas vertentes científica, tecnológica e pedagógica da Química.

O encontro terá lições plenárias, comunicações convidadas, comunicações orais e em painel. Destaca-se a Lição

Plenária de homenagem ao Prof. Alves da Silva.

Diversas iniciativas dinamizadoras estão previstas de ocorrer em paralelo com as lições do encontro.

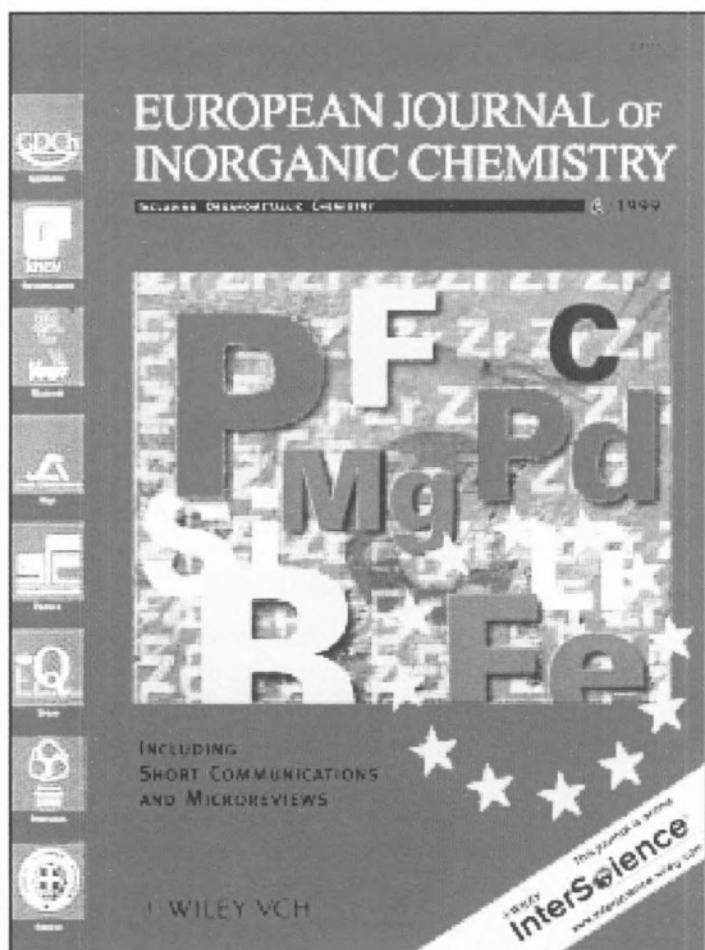
Todos os sócios da SPQ receberão, brevemente, a circular de informação e inscrição. Mais informações podem ser obtidas em: <http://www.xixspq.qui.uc.pt>. Esta página é ainda provisória mas encontra-se em permanente actualização. Informações podem ser pedidas através do seguinte endereço de email: XIXSPQ@qui.uc.pt.

A organização pretende começar a receber inscrições e comunicações a partir do mês de Outubro.

Um especial carinho e expectativa de presença é dirigido aos antigos alunos da UC e em especial aos das Licenciaturas em Química e Química Industrial. Espera-se que estes possam comparecer em força, e com isso matar parte das saudades que Coimbra sempre deixa.

O presidente da CO do
XIX Encontro da SPQ
João Sérgio Seixas de Melo

European Journal of Inorganic Chemistry



Benefit from:

- Full-text available online for subscribers (www.interscience.wiley.com)
- strong international coverage
- faster publication times: articles available online weeks before print edition
- cutting-edge research and information
- low personal subscription rate for members of supporting societies

**12 % more pages
planned for 2000**

supported and owned by Chemical Societies from

B • D • E • F • GR • I • NL • P

To order please contact your society
or EJIC-EJOC@wiley-vch.de

 **WILEY-VCH**



Ivan Villax, 1925–2003

Fundador da Hovione

Ivan Villax, fundador da Hovione, morreu no dia 6 de Junho de 2003, aos 78 anos.

Ivan Villax gostava de dizer, não sem uma certa ironia, que deixou o seu país aos 23 anos, trazendo apenas uma escova de dentes num dos bolsos, um diploma de Engenharia Química no outro e os Russos nos seus calcanhares.

Nasceu em Magyaróvár, uma pequena cidade universitária húngara, a leste de Viena. A sua mãe era descendente de uma conceituada família austro-húngara proprietária de terras, e o seu pai um geneticista húngaro. Em 1948, estando a família num campo de refugiados em Salzburg, chega uma carta do Professor Victoria Pires, na altura Secretário de Estado da Agricultura do Governo português, convidando o seu pai a vir para Portugal. Ódon Villax viria ajudar na fundação, em Portugal, de um centro de pesquisa agronómica no campo da genética de plantas. Ivan chega a Lisboa pouco tempo depois, juntando-se assim à família, depois de finalizar uma pós-graduação em microbiologia no Centre de Recherches Agronomiques de Clermont-Ferrand em França.

Já sabia que o seu futuro estava nos antibióticos e, durante a sua permanência em França, isolou do solo algumas estirpes produtoras de tetraciclinas, que mais tarde designou de *Streptomyces lusitanus*. Em 1952, inicia o seu trabalho no Instituto Pasteur de Lisboa, naquela época um dos mais conceituados laboratórios portugueses.

Os seus primeiros inventos foram na área de cloranfenicol e das tetraciclinas, e na fermentação da penicilina. Neste período, soube tirar partido do equipamento do Prof. Maia Loureiro, o inventor da fermentação aeróbica submergida. Esta tecnologia nacional seria decisiva para vencer os desafios industriais relacionados com a fermentação da penicilina durante a Segunda Guerra Mundial.

Em 1958, casa com Diane Du Boulay e, juntamente com dois outros húngaros, Nicholas de Horthy e Andrew Onody, fundam a Hovione em 1959. Durante os primeiros 10 anos, a firma era um pequeno laboratório de pesquisa, situado na cave da sua casa em Lisboa, perto das Embaixadas americana e britânica. Enquanto Ivan se dedica à investigação química, Diane processa as facturas das vendas, e durante os 45 anos que se seguem formam um casal e uma parceria admirável.

Após uma estreita colaboração com a Fermentfarma Spa, Milan – uma empresa dirigida também por refugiados húngaros – Villax é nomeado director técnico e accionista minoritário. Os processos tecnológicos no campo da fermentação e isolamento das tetraciclinas são então licenciados à Imperial Chemical Industries no Reino Unido, National Fermentation na África do Sul, e International Rectifier em El Segundo, Califórnia, entre outras. Em 1967, a Rachele Laboratories compra a Fermentfarma, e o capital proveniente da venda das acções de Ivan Villax permite-lhe construir a primeira fábrica da Hovione, nos arredores de Lisboa.

Consciente da imprevisibilidade dos processos de fermentação decide dedicar-se à síntese química. Na fábrica, em Loures, desenvolve à escala industrial um processo em 18 passos consecutivos para produzir a betametasona e seus derivados. Na década de 70, a Hovione goza de uma posição privilegiada no mercado japonês, graças às patentes de processo independentes, de que Villax é inventor. À medida que o negócio vai crescendo, surgem os tempos conturbados da revolução de 1974, pelo que Ivan decide enviar os filhos para Inglaterra onde prosseguem os seus estudos. Começa então a procurar um outro local para a expansão dos negócios, o que consegue em 1978 com a abertura de um escritório de vendas em Hong Kong. Nesse mesmo ano, a Hovione visita, pela primeira vez, a Feira de Cantão. Um após o outro, os seus quatro filhos trabalham durante alguns anos no Extremo-Oriente como forma de lhes proporcionar a melhor educação possível.

Em 1982, a unidade fabril de Loures, em plena expansão, começa a fornecer antibióticos semi-sintéticos para o Mercado de Genéricos norte-americano, no que foi acompanhada pela fábrica de Macau para o aumento da capacidade de produção. Isto ocorreu antes da introdução do "Roche/Bolar Amendment", e durante vários anos os colaboradores da FDA ainda se lembravam das amstras de doxiciclina serem entregues às

9h00 da manhã nos seus escritórios em Fishers Lane Rockville, Maryland, nem um minuto antes, nem um minuto depois, da hora de expiração da patente do primeiro inventor.

Na Europa, este produto deu origem a litígios de patentes em que a Pfizer processou, ao longo de vários anos, alguns clientes da Hovione em oito países diferentes. Fiel às suas convicções, Villax apresenta-se voluntariamente em todos os processos como co-defensor. Dotado de uma vontade tenaz, não desiste perante esta adversidade e finalmente, em 1992, chega a um acordo fora dos tribunais. É com desapontamento que vê esta disputa desviar a sua atenção de outros projectos inovadores, apesar de ao longo deste tempo a Indústria ter reconhecido o espírito combativo da Hovione como sendo uma característica do seu fundador. Actualmente, a indústria de genéricos mundial beneficia dos processos eficazes desenvolvidos pela Hovione para o fabrico de muitos outros princípios activos: a minociclina, a roxitromicina, o iopamidol e o iohexol são produtos que permitem à Hovione deter uma posição de líder em vários países.

Ivan Villax sempre demonstrou a sua gratidão para com o País que o acolheu e lhe permitiu iniciar uma nova vida. Sentia-se satisfeito porque, ao fornecer meios genéricos de contraste, a Hovione

estava, de alguma forma, a prestar homenagem ao Prof. Egas Moniz, o pai da angiografia e o primeiro português a receber o Prémio Nobel.

Após a queda do Muro de Berlim, vai diversas vezes à Hungria. A Universidade Técnica de Budapeste, a sua *Alma Mater*, reconhecendo o mérito da sua obra de 40 anos na indústria farmacêutica, concede-lhe o grau de doutoramento e convida-o para membro do Senado Académico. Nessa altura, era já autor de mais de 100 patentes e artigos científicos.

Em 1995, com uma saúde mais debilitada, decide entregar a chefia da empresa ao seu filho Guy, que conta com a gestão de uma equipa altamente profissional. No entanto, Ivan Villax continua diariamente a deslocar-se à fábrica em Loures, sempre interessado em manter-se a par dos novos processos químicos e do curso dos negócios, não se furtando a apontar qualquer falha de rigor, disciplina e manutenção, tanto nos laboratórios como nas restantes instalações fabris. Acompanhado da sua mulher Diane, visitava todos os anos a fábrica de Macau, empenhando-se em encorajar a geração mais nova e a reconhecer os serviços daqueles colaboradores mais antigos.

Nos últimos anos de vida, viu a Hovione tornar-se num fabricante importante de

inibidores de protease do HIV, um medicamento chave no combate à Sida, tendo tomado parte activa no desenvolvimento de muitos projectos envolvendo fármacos para fornecer o princípio activo. Em 2002, a Hovione funda uma fábrica piloto em New Jersey, não muito distante de Rahway onde, na década de 50, Villax declinara uma proposta para trabalhar nos Laboratórios de Pesquisa da Merck. Ele e a sua mulher Diane viajaram pelo mundo inteiro, onde pode satisfazer uma das suas outras paixões, coleccionar plantas de lugares exóticos, que ele próprio plantava e cuidava na sua Quinta nos arredores de Lisboa.

No passado mês de Maio, após graves complicações pulmonares, Ivan, sempre lutador e sempre determinado a controlar o seu destino, consciente de que os hospitais e a ciência nada mais podiam fazer, pediu para regressar a casa. Na sua Quinta em Manique, rodeado das suas flores e árvores, dos seus filhos, netos e da sua mulher Diane, a sua companheira de uma vida inteira, viveu duas semanas de felicidade – morreu na sexta-feira 6 de Junho.

No dia 12 de Junho, foram celebradas Missas de Sétimo Dia na Igreja Matriz em Loures e na Basílica da Estrela em Lisboa.

(texto retirado de www.hovione.pt, com autorização da empresa)

Actualidades Científicas

1.

Um objectivo importante da química moderna é o **controlo activo das reacções químicas**. A excitação selectiva das vibrações moleculares, favorecendo um resultado particular para uma dada reacção, implica geralmente a exposição de grandes quantidades de moléculas a impulsos laser. Ao nível da molécula isolada, uma tal química selectiva, relativamente a um modo de vibração,

pode ser obtida pela injeção de electrões inelásticos por efeito túnel com um microscópio túnel de varrimento (STM). Esta técnica de "cirurgia molecular" está agora [1] a ser utilizada para induzir movimentos controlados de moléculas individuais de amoníaco sobre uma superfície: com o STM a funcionar com corrente e energia apropriadamente seleccionadas, os electrões injectados excitam estados vibracionais que induzem ou o movimento lateral da molécula de NH_3 ao longo da superfície, ou a desorção. Estes resultados ilustram o poder do STM para focar a energia vibracional

sobre uma coordenada escolhida, que é a etapa essencial que assegura o controlo exacto do evento que consiste em quebrar uma ligação, que determina o percurso de uma reacção química.

2.

Meteoritos condríticos ou condritos, as rochas mais antigas no nosso Sistema Solar, consistem numa matriz de grãos finos contendo cóndrulos e inclusões ricas em cálcio e alumínio (CAIs). Os cóndrulos são objectos de silicato quase esféricos de cerca 2 mm de diâmetro

que podiam outrora ter sido gotas fundidas flutuando no espaço. Pensava-se, a partir de estudos de isótopos de chumbo e alumínio, que os CAIs eram materiais de alto ponto de fusão formados cerca de 2 milhões de anos antes dos côndrulos. De acordo com este calendário, os CAIs teriam sido os **primeiros sólidos formados no Sistema Solar**. Mas a descoberta de um fragmento de côndrulo embutido num CAI muda esta imagem. O caso oposto, côndrulos com CAIs embutidos, tinha sido encontrado previamente. Parece agora [2] que os eventos de formação de CAIs e de côndrulos não foram independentes. Antes se sobrepuseram durante os primeiros tempos da evolução do Sistema Solar.

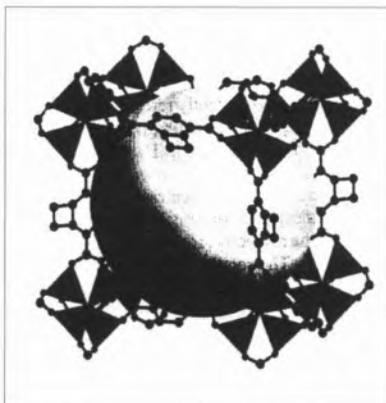
3.

Formas de **bromo reactivo** têm uma contribuição importante na química do **ozono estratosférico**, sendo responsáveis por um terço da depleção do ozono catalizada por halogénios, apesar de estarem presentes em menor quantidade que os derivados do cloro. Todavia, as fontes do bromo atmosférico não são bem conhecidas. Uma nova técnica espectroscópica está agora a ser utilizada [3] para detectar o monóxido de bromo gasoso na coluna de fumo vulcânico do vulcão "Montes Soufrière" na Ilha Montserrat, um vulcão que está em erupção desde os meados de 1995. É o primeiro relato de monóxido de bromo em emissões vulcânicas e as quantidades presentes sugerem que os vulcões poderiam fornecer bromo suficiente para a atmosfera a fim de ter um efeito significativo sobre as concentrações regionais e talvez globais de ozono.

4.

Todos os anos são fabricados milhões de toneladas de epóxidos, principalmente através de um processo utilizando o cloro como oxidante. Kamata *et al.* [4] relatam que um anião polioxometalato baseado em tungsténio permite a **produção eficiente de uma larga varie-**

dade de epóxidos utilizando o peróxido de hidrogénio (H_2O_2). Ao contrário de muitas vias com H_2O_2 , esta reacção evita a produção de O_2 que aumenta os perigos de explosão em condições industriais.



5.

Materiais microporosos baseados em compostos de esqueleto organo-metálico oferecem possibilidade de variações sistemáticas do tamanho dos poros. Foi evidenciado que uma família de compostos baseados em agregados Zn-O-C octaédricos e grupos de ligação aromáticos tem uma grande capacidade de adsorção do metano em condições ambientais. Rosi *et al.* [5] relatam que um desses materiais, o MOF-5, tem também uma **grande capacidade de captação de hidrogénio**. O espectro de difusão inelástica de neutrões do movimento de rotação do hidrogénio a 10 K apresenta dois picos mais acentuados a 10,3 e 12,3 mili electrão-volt (meV) correspondendo às posições de ligação ao zinco e aos grupos aromáticos de ligação, respectivamente. Às temperaturas do azoto líquido, o material adsorve 4,5 % em massa de hidrogénio e um derivado do MOF-5 adsorve 2 % em massa de hidrogénio à temperatura ambiente e com uma pressão de 20 bar. A flexibilidade de ajuste deste sistema de materiais pode permitir a obtenção do objectivo da engenharia de 6,5 % de armazenamento desejado para aplicações em automóveis.

6.

O zinco é normalmente oxidado directamente a Zn^{2+} e tentativas anteriores para criar espécies Zn^+ produziram dímeros diamagnéticos do catião monovalente. Tian *et al.* [6] utilizaram um peixeiro molecular, silico-aluminofosfato que adopta a estrutura da cabazita (SAPO-CHA), para **criar catiões Zn^+ isolados**. Os grupos fosfato na rede conduzem à presença de um a dois prótons ácidos que podem reagir com o Zn metálico para libertar hidrogénio. Todavia, estas posições são suficientemente isoladas para evitar que qualquer átomo de Zn liberte um segundo átomo de hidrogénio e oxidar a Zn^{2+} . Espectros de ressonância de spin electrónico mostram a presença dos catiões paramagnéticos Zn^+ .

7.

A síntese e a caracterização de dois tipos de agregados inorgânicos que evidenciam as elevadas conectividade e simetria dos fulerenos baseados em carbono, como o C_{60} , é o assunto de dois trabalhos. Moses *et al.* [7a] prepararam o anião $[As@Ni_{12}@As_{20}]^{3-}$ através de uma simples via em solução. Nesta estrutura, um átomo de arsénio está situado no centro de um icosaedro de Ni, que, por sua vez, está no centro de um dodecaedro de arsénio. Um composto inorgânico, que apresenta os mesmos motivos de anéis alternados de cinco e seis membros como se vê no C_{60} , foi sintetizado por Bai *et al.* [7b]. Fizeram reagir um complexo $Fe(\eta^5-P_5)$ com $CuCl$ para criar um composto onde os anéis ciclo- P_5 estão rodeados pelos anéis P_4Cu_2 , para formar os dois hemisférios ligados em ponte pelas unidades $[Cu_2Cl_3]^-$ e $[Cu(CH_3CN)_2]^+$. A estrutura geral, que contém 90 átomos no centro, é cerca de três vezes maior que o C_{60} .

Referências

- [1] J.I. Pascual, N. Lornte, Z. Song, H. Conrad, H.-P. Rust, *Nature* **423** (2003) 525.

[2] S. Itoh, H. Yurimoto, *Nature* **423** (2003) 728.

[3] N. Bobrowski, G. Hönninger, B. Galle, U. Platt, *Nature* **423** (2003) 273.

[4] K. Kamata, K. Yonehara, Y. Sumida, K. Yamaguchi, S. Hikichi, N. Mizuno, *Science* **300** (2003) 964.

[5] N.L. Rosi, J. Eckert, M. Eddaoudi, D.T. Vodak, J. Kim, M. O'Keeffe, O.M. Yaghi, *Science* **300** (2003) 1127.

[6] Y. Tian, G.-D. Li, J.-S., Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **125** (2003) 6622.

[7a] M.J. Moses, J.C. Fettinger, B.W. Eichhorn, *Science* **300** (2003) 778;

[7b] J. Bai, A.V. Virovets, M. Scheer, *Science* **300** (2003) 781.

Olivier Pellegrino

revisão de A. M. Botelho do Rego

I Fórum da Química

Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, 16 e 17 de Outubro de 2003

O I Fórum da Química (I FQ) – **Três faces da Química: Investigação, Indústria e Ensino** – irá realizar-se no Grande Auditório da FCT no Campus da Caparica, nos dias 16 e 17 de Outubro de 2003. Este colóquio de grande importância para alunos e recém licenciados nas áreas Científicas da Química, Bioquímica, Biologia e Farmácia, contará com a presença de vários investigadores das diferentes áreas científicas.

Este invento tem como objectivo definir o perfil do panorama nacional na área das tecnologias químicas e biotecnológicas, bem como as suas perspectivas futuras.

O programa do I FQ consistirá em 15 comunicações orais, 3 das quais inseridas no painel temático **Indústria** (16 de Outubro), ao passo que as restantes terão como tema de fundo a **Investigação**.

O I FQ conta com a participação de numerosos conferencistas, cuja lista se encontra abaixo indicada por ordem alfabética:

Dra. Algina Monteiro – *Polícia Judiciária*

Prof. Cláudio Soares – *ITQB*

Dra. Dália Barbosa – *CIPAN*

Doutor Duwe de Bóer – *IDP*

Prof.^a Doutora Maria Eugénia Meirinhos – *INETI*

Prof.^a Doutora Maria Helena Gil – *FC/UC*

Doutora Maria Marcelo Curto – *INETI*

Prof. Miguel Viveiros – *IHMT*

Dr. Moisés Mallo – *IGC*

Doutor Nuno Palma – *Bial*

Prof. Pedro Paulo Santos – *IST*

Doutor Peter Jordan – *INSDRJ*

Doutor Rui Gomes – *IBET*

Doutora Sofia Goes – *STAB – vida*

Prof. Doutor William Heggie – *Hovione*

Para além das conferências, existirá, dia 17 de Outubro, um debate com o tema "Três faces da Química: Investigação, Indústria e Ensino", tendo como moderador o Prof. Pedro Tavares e conta com a presença dos seguintes intervenientes:

Ministro Pedro Lynce de Faria

Prof. Doutor Baltazar Castro – *Requimte*

Prof.^a Doutora Ana M.^a Lobo – *DQ-FCT/UNL*

Prof.^a Ilda Sanches – *SABT – FCT/UNL*

Dr. Filipe Soeiro – *Parque Expo*

Dr. Henrique Fernandes – *Ecopilhas Lda.*

Todas as indicações do simpósio, incluindo o título das comunicações, podem ser encontradas no site:

www.dq.fct.unl/forum_da_quimica.



Einstein Archives Online
www.alberteinstein.info

Lançado oficialmente em Maio, este extraordinário arquivo digital recolhe os trabalhos de um dos maiores cientistas do século passado: Albert Einstein. Os visitantes podem começar a visita pelo acervo de mais de 3000 documentos digitalizados a partir dos manuscritos originais que tanto podem ser artigos científicos como notas de viagens (maioritariamente em alemão). Se preferirem, podem ir directamente para uma base de dados que reúne cerca de 43000 registos de documentos que incluem, entre outros, correspondência profissional e pessoal. Existe ainda um espaço (Gallery) que contém os documentos mais procurados, por exemplo, o artigo em que Einstein menciona a famosa equação $E=mc^2$. Para os mais interessados, recomenda-se também a visita ao site da notável exposição, recentemente encerrada, Einstein do American Museum of Natural History, www.amnh.org/exhibitions/einstein.



ChemCases
www.chemcases.com

ChemCases é um conceito interessante e inovador. Baseado na Web, é constituído por um conjunto de doze *case stu-*

dies destinados a serem utilizados como suplemento de um currículo de uma disciplina de Química Geral. Os autores, da Kennesaw State University, Geórgia, EUA, pretendem que o ensino de Química seja complementado com a análise de casos reais de produtos comerciais ou situações vividas no dia-a-dia. O estudo de casos como o desenvolvimento de bebidas isotónicas e energéticas para desportistas, a utilização do silicóne como vedante e em implantes, o desenvolvimento de substituintes para o açúcar, e outros mais, permite verificar a importância da Química bem como a aplicação dos conceitos ensinados. Recomendado não só para estudantes mas também para professores, sobretudo para os interessados em enriquecer as suas aulas.



Chem4Kids
www.chem4kids.com

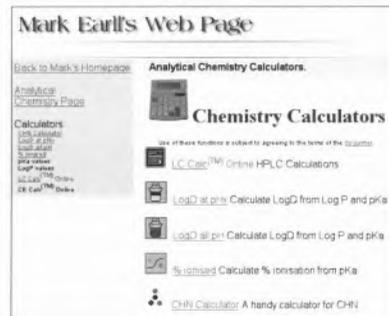
Fazendo parte de uma rede de sites sobre Biologia, Física, Geografia e Química dirigidos a um público juvenil, Chem4Kids apresenta conceitos básicos de Química de uma forma simples e concisa, facilmente compreensível por todos. Com uma navegação muito simples, o site divide-se em seis secções principais: reacções, elementos, átomos, matéria, bioquímica e etcetera (miscelânea). Com uma razoável quantidade de informação, falta-lhe apenas um pouco mais de interactividade e alguns exemplos práticos, tal como é possível encontrar em Kitchen Chemistry, pbskids.org/zoom/kitchenchemistry. Dirigido à mesma audiência, neste site propõe-se uma visita a uma cozinha virtual para realizar algumas experiências no âmbito de um jogo. Para os mais

afeitos, é proposta ainda a realização das mesmas experiências, desta vez, numa cozinha real...



The Wired Chemist
wulfenite.fandm.edu

Intitulando-se a si mesmo como uma colecção de recursos de Química, este site é sobretudo um bom ponto de partida para os que pretendam iniciar a sua viagem pela Química na Internet. Com secções especialmente importantes de cristalografia e espectroscopia RMN, apresenta também sugestões para bases de dados, emprego, cursos online e jornais e revistas científicas. Se é certo que o visitante não vai encontrar uma vasta colecção de *links*, a organização deste espaço permite aceder rapidamente aos sites mais representativos de cada secção ou a informação muito útil, como, por exemplo, uma impressionante lista de tabelas com valores que convém ter sempre à mão.



Chemistry Calculators
www.raell.demon.co.uk/chem/calcs

Existe uma enorme variedade de sites dedicados a cálculos *online* relevantes

em Química que vão desde o simples acerto de equações químicas, stanford.edu/~glassman/chem/eb.htm, até cálculos mais sofisticados como, por exemplo, geometria de moléculas, www.shef.ac.uk/chemistry/chemputer. O site aqui referenciado apresenta uma série de calculadores, especialmente na área de Química Analítica. Incluídos na página pessoal de Mark Earll, é possível encontrar, entre outros, calculadores para HPLC (uma extensa coleção que inclui, por exemplo, conversores de unidades de pressão, propriedades de solventes comuns e propriedades de soluções tampão), percentagem de ionização de ácidos e bases a partir de valores de pH e pKa e percentagem em massa de CHN. Recomenda-se também uma visita à página de Química Analítica do mesmo autor onde se pode encontrar um excelente guia sobre medição experimental de valores de pKa e coeficientes de partição.



nanotechweb

www.nanotechweb.org

A nanotecnologia está a assumir uma importância cada vez maior nas nossas vidas. Como reflexo disso, na Internet começam a surgir, cada vez em maior número, sites dedicados a esta temática. O portal aqui apresentado, com a chancela de qualidade do Institute of Physics, pretende reunir informação atualizada sobre esta área, incluindo no-

tícias, artigos científicos publicados mais recentemente (embora o acesso a alguns deles seja limitado), calendário de conferências, links para outros recursos disponíveis, oportunidades de emprego, enfim, toda a informação que um visitante interessado esperaria encontrar, organizada de um modo muito elegante. Um outro portal a merecer referência, Nanotechnology Now, pode ser encontrado em nanotech-now.com. Neste, o conteúdo encontra-se distribuído por mais secções do que no anterior, algumas das quais muito interessantes como, por exemplo, entrevistas, "profecias" e ética (da utilização da nanotecnologia).

Jorge Marques Gonçalves

FCUP

jgoncalv@fc.up.pt

Comissão Científica

- Björn Lindman (U. Coimbra/U. Lund)/Presidente
- Hugh D. Burrows (U. Coimbra)
- A.M. D'A. Rocha Gonsalves (U. Coimbra)
- João C.M. Bordado (I.S. Técnico)
- João Rocha (U. Aveiro)
- J.M. Gaspar Martinho (I.S. Técnico)

Comissão Organizadora

- J. Sérgio Seixas de Melo (U. Coimbra)/Presidente
- Artur J.M. Valente (U. Coimbra)
- Isabel Gonçalves (U. Aveiro)
- Jorge M.C. Marques (U. Coimbra)
- Fernando Pina (U. Nova Lisboa)
- M. Elisa S. Serra (U. Coimbra)
- M. Ermelinda Eusébio (U. Coimbra)
- M. Helena M. Gil (U. Coimbra)
- M. João Moreno (U. Coimbra)
- Marta Pinero (U. Coimbra)

Colaboradores

- Núcleo de Estudantes de Química, UC

Informações:
XIX ENCONTRO SPQ
Dept. Química, Univ. Coimbra
Tel: 239 852080; 239854463 & Fax: 239827703
Email: XIXSPQ@qui.uc.pt • <http://www.xixspq.uci.ucpt>

design | GABINETE de IMAGEM
Fundação João Jacinto de Magalhães
A773/2003

Encontro Nacional da Sociedade
Portuguesa de Química

XIX

XIX Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

15 - 17 Abril 2004 | Coimbra



Departamento de Química
Universidade de Coimbra



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

No jardim com Roald Hoffmann: Químico e Poeta

CHRISTOPHER DAMIEN AURETTA*

Resumo

A poesia de Roald Hoffmann, químico e poeta, põe em relevo a capacidade humana de abordar o mundo que nos rodeia de modo múltiplo: uma conversa entre estas abordagens divergentes é possível no mesmo ser pensante. Hoffmann explora a relação intensa existente entre a

mente e a matéria, relação essa que constitui o fundamento da nossa identidade como espécie. O que decorre deste olhar poético-científico na poesia de Hoffmann leva-nos a meditar sobre o nosso destino como seres profundamente inquiridores.

Javé Deus plantou um jardim no Éden, no Oriente, e aí colocou o homem que havia modelado. Javé Deus fez brotar do solo todas as espécies de árvores formosas de ver e boas para comer. Além disso, colocou a árvore da vida no meio do jardim, e também a árvore do conhecimento do bem e do mal. (...) Javé Deus tomou o homem e colocou-o no jardim do Éden, para que o cultivasse e guardasse. E Javé Deus ordenou ao homem: «Podes comer de todas as árvores do jardim. Mas não podes comer da árvore do conhecimento do bem e do mal, porque no dia em que dela comeres, com certeza morrerás». (Génesis, 8-17)

Com a dominação absoluta da técnica moderna cresce o poder — tanto a exigência como a eficácia — da língua técnica adaptada para cobrir a latitude de informações mais vasta possível. É porque se desenvolve em sistemas de mensagens e de sinalizações que a língua técnica é a agressão mais violenta e mais perigosa contra o carácter próprio da língua, o dizer como mostrar e fazer aparecer o presente e o ausente, a realidade no sentido mais lato.

Mas porquanto a relação do homem, tanto quanto ao ente que o rodeia e o sustenta como ao ente que é ele próprio,

repousa sobre o fazer aparecer, sobre o dizer falado e não falado, a agressão da língua técnica sobre o carácter próprio da língua é ao mesmo tempo uma ameaça contra a essência mais própria do homem. (Martin Heidegger, "Língua de tradição e língua técnica")

A técnica deve ser subordinada ao espírito, a máquina deve ser um instrumento obediente ao homem, um meio. O que significa a humanização da técnica, que tende a tornar-se desumana. (Nicolas Berdiaeff, "Progresso Técnico e Progresso Moral")

Men (and women) are not/as different from molecules/as they think. (Roald Hoffmann, "Men and Molecules")

Se nós quiséssemos imaginar uma tarde passada em conversa com Roald Hoffmann – professor e investigador, químico e poeta – cada um de nós – investigadores nas ciências físico-químicas nalguns casos, investigadores na área das ciências sociais e humanas noutros, e, ainda, leitores/convivas entusiasmados sentados à mesa da sua poesia (que se tem vindo a publicar em colectâneas desde finais dos anos oitenta), iríamos sem dúvida ter a oportunidade de nele testemunhar a conjugação de várias

maneiras de ver o mundo, uma abordagem coerente e múltipla a este mundo que simultaneamente forjamos e nos alberga. Por umas horas encontrar-nosíamos numa situação privilegiada, i.e., a de participarmos com ele num diálogo de carácter plural e de contornos coerentes embora imprevisíveis. Teríamos, queremos crer, a ocasião rara de presenciar acima de tudo até que ponto é possível um ser humano – criatura pensante por excelência e animal consciente em busca da sua liberdade – praticar um profundo diálogo com o mundo, ora como realidade histórica, ora como fenómeno cósmico. Hoffmann, devido à nossa formação intelectual específica, será abordado aqui não como um químico que escolheu o laboratório para ser o epicentro das suas investigações e reflexões mas, antes, como o poeta que elabora um laboratório de palavras a fim de concretizar e desenvolver a sua convivência com o universo. Nesta tarde de conversa, cada um de nós – convivas imaginários de Hoffmann – iria levar consigo o entusiasmo particular das suas próprias buscas, das suas investigações científicas bem como um modo de falar peculiar, uma linguagem característica mediante a qual cada conviva presente aprendeu a contemplar o uni-

* Christopher Damien Aretta é professor auxiliar na Secção de Ciências Sociais Aplicadas (SACSA) da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa. Organiza seminários em Ciência e Literatura e Aspectos do Pensamento Contemporâneo.

verso e, simultaneamente, interagir com ele no palco das suas reflexões, como se o mundo – cósmico e histórico – fosse o lugar de um drama profundamente humano: o guião infindo de um diálogo entre a mente e a matéria, um texto em que a humanidade e o universo se interpelam, entrecruzam e co-determinam. Contudo, este drama não nos é simplesmente dado a representar; é escrito por nós em colaboração com a matéria sem nunca termos nós direitos exclusivos de autor...

Já o sabíamos sem dúvida antes de nos deliciar com esta imaginada tarde com o químico-poeta: toda a reflexão atenta, prolongada e deveras afinada encerra e encena um momento de perplexidade e um despertar. Este despertar da consciência do investigador que aborda a questão da natureza, da causa e do significado da nossa realidade, quer histórica, quer cósmica, interioriza um momento indispensável para toda a sua reflexão subsequente: aquele momento, que pode ocorrer de modo estrondoso ou quasi-imperceptível na vida de cada ser humano, em que a reflexão deixa de existir em termos de uma auto-suficiência (afinal, sempre ilusória) e se torna mais propriamente *a autobiografia da dúvida*. Toda a reflexão digna de se desenvolver nasce numa resistência: o mundo só se nos entrega condicionalmente, só se nos manifesta à luz ténue de um diálogo difícil com o real, *só se desdobra em saber quando nós próprios renascemos com ele como pergunta*. Uma conterrânea de Hoffmann, a poetisa polaca Wislawa Szymborska, recipiente do Prémio Nobel de Literatura em 1995, desenvolve poeticamente esta noção de resistência num bem conhecido poema intitulado "Conversa com a pedra". A voz que fala neste poema "bate" insistentemente "à porta" de uma "pedra" que lhe recusa a entrada. Uma intransponibilidade declara-se-nos. Por mais insistente, por mais solícita que seja esta voz humana, a pedra mantém-se fiel ao seu temperamento empedernido, pois, segundo ela, nós, seres humanos, carecemos de um sentido essencial: o de verdadeiramente pertencermos à Natureza. A "conversa", portanto, torna-se menos uma instância

de diálogo do que um drama de incomunicabilidade. Não é questão de surdez total, mas sim de ruído ininterrupto. A mente e a matéria são, digamos, convivas buliçosos e discordantes. A civilidade entre elas é precária e dissonante. É o drama fundamental do nosso universo. Não seria qualquer "conversa" entre cientistas e poetas, como esta imaginada entre químicos e também poetas no jardim da casa de Hoffmann, o cenário de ruidosas guerras epistemológicas? E, contudo, todos nós pertencemos à fundamental condição de não pertencermos ao mundo que o nosso questionamento insistente (que cresce dentro de nós "como erva" segundo afirma Hoffmann num poema que iremos abordar mais abaixo) procura tornar menos opaco: amamos mais aquilo que nos resiste.

A resistência da matéria da pedra no poema de Szymborska impera e, está claro, esta pedra tão sábia na sua petrilidade tem razão. Há uma desmedida, uma arrogância inata que nos é inerente: uma curiosidade insaciável impele-nos e leva-nos a interromper a partitura inconsciente do cosmos. Rasgamos a harmonia inconsciente do cosmos ao queremos penetrar no tecido dos seus átomos (aquelas "grandes salas vazias") no texto das suas leis porque queremos saber. Na modernidade, a única maneira de pertencermos à Natureza não reside numa contemplação passiva dos seus fenómenos mas antes na elaboração das questões mais fecundas. Somos cidadãos da curiosidade: a nossa pátria é o ponto de interrogação. Criaturas desenraizadas, autênticos nómadas ontológicos (algum dia soubemos ou sabemos quem somos?, alguma vez vislumbrámos as dimensões exactas do nosso ser?), importunamos e, perturbamos com o nosso questionamento. É a nossa maneira de ser: pertencemos ao cosmos em diagonal. Até certo ponto, só assim o universo se torna ele próprio, i.e., na memória que lhe damos ao bater à porta do seu enigma.

Na verdade, a nossa carência é o que nos permite imaginar a possibilidade de nos relacionar com a Natureza, pois relação implica necessariamente o reco-

nhecimento de uma distância, de um intervalo entre nós e algo exterior a nós, i.e., a existência de uma realidade alterna. Nós pertencemos e ao mesmo tempo não pertencemos à partitura inconsciente do cosmos. A pedra, por sua vez, obstinada e pétrea nas suas argumentações, delinea precisamente a resistência da matéria à penetração, a barreira do cosmos inconsciente face a um ser difícil e instável:

– Sou de pedra – diz a pedra –
impossível perturbar a minha seriedade.
Vai-te daqui.
Faltam-me os músculos do riso.

Bato à porta da pedra
– Abre. Sou eu.
Ouvi dizer que há em ti grandes salas
[vazias,
nunca vistas, belas em vão,
mudas, sem o eco dos passos de
[ninguém.
Reconhece que tu própria pouco sabes
[disso.

– Grandes salas e vazias – diz a pedra –
só que lá não há lugar.
Belas, talvez, mas de beleza inacessível
aos teus pobres sentidos.
Poderás reconhecer-me, mas nunca me
[conhecerás.
Em toda a superfície me volto para ti,
mas o meu interior volta-te as costas.¹

Embora possamos pressentir, leitores deste poema, uma posição quase defensiva por parte da pedra perante um ser tão frágil e ao mesmo tempo tão perturbador, o poema não se reduz a um mandamento: Proibido Entrar. Muito pelo contrário, apreciamos muito mais a discreta lição que efectivamente produz para a nossa condição de nómadas, desenraizados e insaciáveis: a resistência torna necessário compreendermos a nossa fragilidade e a nossa força. Fomos, a Tradição revela-nos, miticamente expulsos do Jardim do Éden. Na sequência da nossa abordagem ao poema de Szymborska (veja-se o poema na íntegra em Anexo), como iremos interpretar este mito milenar do modo mais positivo? Talvez se considerarmos a nossa expulsão do Paraíso não tanto como o resultado

desastroso de uma tentação satisfeita mas sim como a etapa necessária de uma vocação. Ou dito com outras palavras, só no construir de uma relação responsável e reflectida com o mundo histórico e cósmico iremos descobrir a nossa verdadeira residência na Terra. Hoffmann parece admitir esta ideia no seu poema "Perscrutadores e Determinadores" ao aludir ao mítico evento de expulsão da nossa atribulada humanidade para fora da quietude paradisíaca ao mesmo tempo que invoca a nossa subsequente história como sendo trágica, inevitável e também irresistível, i.e., inseparável da nossa identidade. Questionamos porque assim dialogamos com o universo. Procuramos reflectir sobre o universo porque até certo ponto não lhe pertencemos. A natureza humana, afirma Hoffmann, é *impulsionada a questionar a materialidade mesma desse Jardim edênico* (a composição química, digamos, desse jardim mítico bem como essa mesma matéria mítica que se traduz em conteúdo espiritual). A nossa compulsiva curiosidade e a nossa necessidade de aumentar o nosso saber definem-nos essencialmente: não exibem apenas contingências. Quer dizer: somos criaturas que produzem risco e surpresa, compreensão e desordem, civilização e caos em nome de uma consciência mais alargada, i.e., de uma maioridade cultural. Não impede que as dúvidas nos assolem e nos façam claudicar:

(...) Postulamos então, sem irmos mais longe na nossa consciência, que
[essas
melodias e piroetas feitas pela mente

e a matéria poderiam antes ter sido permitidas continuar informúladas,
[inexploradas
e nós assim sairíamos os beneficiários.

Mas não, não. Os *ur-segredos* da Natureza não existem passivamente. Crescem na mente como erva,

estrangulam-nos com a sua iminência ao passo que nós somos as ferramentas
[do jardineiro –
a Natureza – que assim no-los confia.

Estes segredos não ficarão jamais ocultos. E assim... quem dá alimento e quem
[vende,
os sacerdotes e os governadores, todos
[a nós

nos escolheram para personagens numa tragédia. Em exaltada loucura alimentada pela erva de tudo o que aprendemos, aprendemos desprovidos de escolha,

aquilo que porventura irá fazer-nos mal. É-nos inerente a dor de saber, conhecer, o orvalho iluminado

do rebento serpentino
do feto,
no instante de se desdobrar.
de se desocultar,
já pronto para nos consumir.²

O cientista responsabiliza-se, como todo o ser humano o deve fazer em relação aos seus actos e às consequências, directas e indirectas, das suas acções, mas não abdica dessa actividade inerentemente humana que é questionar, contemplar, duvidar e conhecer. A única maneira do Jardim do Éden perdurar em nós de modo significativo reside agora nisto: onde miticamente imperavam a fronteira intransponível de uma transcendência, o estado perpétuo de uma paz (a linguagem dos habitantes do Éden e a ordem cósmica sendo uma e única, sem imprevisibilidade nem opacidade) agora operam a transgressão de toda a fronteira em nome de uma busca de saber insaciável e a investida imparável da investigação moderna (técnico-científica) no seio da Natureza. Não se vislumbra neste poema todavia nenhuma nostalgia por um retorno ao mundo mítico expresso no poema de Hoffmann. O Jardim mítico não poderia ser nunca, no entender do poeta Hoffmann, a nossa verdadeira casa nem o nosso endereço epistemológico mais autêntico. Este retorno poderia oferecer, na melhor das hipóteses, tão-só um abrigo ilusório. A maioridade cultural, a consciencialização acarretam desamparo, pergunte-se a Fausto, herói atomen-tado da nossa desamparada moderni-

dade. O jardim edênico representa, isso sim, um modo de saber, uma teoria do universo, digamos, que, ao cumprir com o seu destino questionante e insatisfeito, a humanidade não pôde deixar de transgredir. Prolonga-se agora a primeira tragédia da humanidade a ser expulsa do seu paraíso no interior deste retrato poético da humanidade precisamente porque o saber, intuimos, está inextricavelmente ligado ao acto, nomeadamente, à intervenção técnico-científica nos processos da Natureza. Essa intervenção cada vez mais potente e de consequências históricas cada vez mais impactantes exige que os "perscrutadores" e os "determinadores" tomem conhecimento da fragilidade da nossa própria força que amiúde se recusa a reconhecer limites. Ora, o transgredir de todo o limite ao nível da compreensão é uma coisa; o transgredir de todo o limite a nível moral é bem outra. Aliás, sabemos-lo após a experiência sombria do século vinte: pode haver progresso no domínio de saber tecnológico ao mesmo tempo que reina um período de extrema barbárie³. Assim, o novo mito – o mito que organiza a nossa sensibilidade contemporânea de modo tão vigente – é o da nossa racionalidade triunfal mas trágica, o da autoconsciência de uma vocação histórica libertadora e cruel. Contudo, Hoffmann valoriza esta vocação sem furtar-se ao seu fardo moral ao passo que o filósofo Martin Heidegger (veja-se citação em epígrafe) vê mais exclusivamente pairar a ameaça e o empobrecimento sempre que as linguagens técnicas predominam na cultura humana. As questões que Heidegger levanta são pertinentes e promovem o aprofundar das nossas reflexões. Talvez a nossa conversa imaginada com Hoffmann iria promover uma maior capacidade de acolhimento do discurso do Outro, i.e., do do cientista por parte do poeta, do do poeta por parte do cientista. Resultaria disto uma experiência de maior *civilidade epistemológica*, uma consciência partilhada de unidade (embora nunca apaziguada) entre as várias linguagens de investigação do real. Afinal de contas, somos dotados da capacidade de acolher aquilo que nos é refractário.

Consequentemente, a poesia de Hoffmann, tal como a poesia do poeta português António Gedeão (pseudónimo do professor de ciências físico-químicas e historiador da ciência Rómulo de Carvalho)⁴ incorpora na sua poesia um forte impulso pedagógico. Por um lado, o químico Hoffmann deseja educar os nossos poetas: ensiná-los a ver o universo em que homens e moléculas sejam finalmente vistos como parentes próximos na grande família cósmica. Para tal, devemos ser aprendizes permanentes, as nossas pedagogias devem ser a realização de um saber baseado no questionamento, a nossa ética deve constituir a prática do diálogo acima de todo o discurso meramente utilitário. O ser humano (os poetas sabem-no muito bem) é criador de relações de proximidade entre os seres e as coisas (vejam-se os versos de Hoffmann citados em epígrafe em que o poeta recorda o parentesco profundo entre moléculas e seres humanos) mais do que consumidor de utilidades. O que o cientista-poeta pode ensinar-nos, quer sejamos poetas ou não, é a continuidade patente entre o infinito e o ínfimo, entre o visível e o invisível, entre a palavra e a matéria: tudo existe num horizonte de questionamento, no desejo urgente de narrar o mundo que observamos, investigamos e habitamos.

Recordando de novo a nossa conversa decorrida em Ítaca, Nova Iorque, nos arredores do *campus* da Universidade de Cornell, vemos como é fecundo contemplarmos uma certa paisagem temática, um certo percurso de ideias que nos envolvem a todos num mesmo exercício de elucidação de sombras, i.e., numa estruturação das nossas dúvidas, essas mesmas dúvidas que potenciam o nosso desejo de comunicação uns com os outros. Um desejo que nos une por sua vez numa mesma tensão criativa: a de procurarmos pela vida fora os instrumentos mais poderosos e incisivos para nos aproximarmos do real. Embora não possuamos o "sentido de pertencer" segundo a "pedra" do poema já abordado, persistimos: *queremos chegar a poder tratar o universo por tu*. Mais: desejamos elevar esse tu ao seu estatuto mais estranhamente humano: um universo

que se consubstancia com a nossa condição histórica. Só ao abandonarmos o jardim edénico é que ele renasceu dentro de nós em forma de pergunta e relação; só no momento de morrermos para o mito do Génesis é que nascemos para o mundo. Só na medida em que o universo nos resiste é que descobrimos a nossa verdadeira identidade. O universo está intimamente relacionado connosco, por assim dizer, mas jamais de modo dado e imediato. O desafio reside no seguinte: como iremos atingir, digamos, o mundo em toda a sua superfície complexa? Como iremos articular a sua omnipresente e omni-activa literalidade (à espera dos seus tradutores e co-autores que somos nós)?

O poema "Evolution" de Hoffmann proporciona-nos uma experiência desta literalidade extática que o poeta e o químico bem conhecem. Neste poema que abre a segunda colectânea de poemas publicada por Hoffmann, em 1990, faz com que o poeta e o químico que nele residem manifestem a sua íntima co-autoria na sua compreensão do mundo. Entrelaçando a descrição de químicos operativos nos insectos empregues para fins de reprodução e identificação mútua com apontamentos diarísticos da sua vida doméstica – num Domingo soalheiro – com todos os seus rituais matinais, a linguagem do poema lentamente adquire uma densidade enigmática. Cria-se no leitor um estado de suave expectativa. O que estará a acontecer nestes versos? O que quererá transmitir-nos? Como poderemos compreender este momento? Que saber frágil encerrará?

*The pheromone has three components:
one from the male, frontalin,
exo-brevicommin wafted by the female
and (ingenious)
abundant, pitch-smelling myrcene
from the host pine.
I had written this the night before,
broken it down into short lines.
When I woke up Sunday and sat down
[to work,
quietly, with a second cup of coffee,
the sun was on my desk.]⁵*

O que consegue aqui o poeta? Nestes poucos versos onde se destaca a transparência descritiva, i.e., uma deliberada aproximação estilística do poema à escrita de um naturalista em vias de transmitir as suas observações da vida natural numa linguagem denotativa, Hoffmann demonstra no poema como a escrita do mundo natural e a escrita íntima do nosso ser se podem fundir numa única superfície textual. Ciência e poesia podem, por assim dizer, formar um único tecido sem costura. Podem produzir um fio ininterrupto de revelação. Lemos ao mesmo tempo aqui o livro da Natureza – as suas maravilhosas reacções químicas, por exemplo – e, porque não?, a reacção íntima entre Hoffmann e a Natureza, a matéria e uma consciência apreendidas num momento de apreensão única que o poema regista. Primeiro, porém, as diferenças devem ser consideradas. As fronteiras do mundo natural e as fronteiras do acto de significação que concretiza o poema não coincidem exactamente nem imediatamente. Como poderiam? A escrita não é um processo natural mas sim uma invenção humana. Cabe a nós, leitores, traçar um percurso entre ambas. Só assim, na nossa capacidade de imaginar uma relação no interior da diferença (mundo natural por um lado, mundo subjectivo por outro), poderemos compreender a sua até agora invisível unidade de significação. A mente e a matéria formam aqui uma experiência de apreensão congeminada que o poema precipita. Porventura esta ideia de uma apreensão congeminada actue noutra poema de Hoffmann: "Next Slide, Please" (veja-se o poema na íntegra no Anexo), publicado na sua primeira colectânea de poemas, em 1987. Neste poema lemos a transcrição *ipsis verbis* de uma conferência proferida pelo químico Hoffmann. No poema, a apresentação em verso lembra-nos, porém, de que todo o acto de significação jamais se limita a um mero acto de citação ou de reprodução de um significado anteriormente estabelecido. Toda a citação é inerentemente provocadora ou, até, subversiva. Mesmo quando Hoffmann se cita a si próprio, transladando um momento de comunicação científica

para uma nova concretização poética, o resultado é inesperado. O poema é, digamos, experimentalmente muito frutífero. O que muda então neste poema em relação à sua encarnação anterior sob a forma de uma comunicação feita plausivelmente numa reunião de colegas de investigação? Talvez isto: o mundo não envelhece desde que o vivamos e pensemos num acto de êxtase investigativo e de escuta intensa. Temos uma multiplicidade de linguagens que renovam a relação entre a mente e a matéria. Daí que cada linguagem seja aparentada com todas as outras. Numa conversa entre estas linguagens (recorde-se que estamos nós todos sentados no jardim de Hoffmann, poetas e químicos), cada uma capta à sua maneira. Nenhuma usurpa o valor das outras, nenhuma conhece uma fronteira intransponível: enraízam-se, portanto, na experiência de uma paixão comum.

O poema é uma espécie de reacção química em si: como o macho e a fêmea que se referem nos versos supracitados, compelidos a realizar os seus rituais de atracção e sedução por via de feromonas, o poema reúne o mundo, o poeta e o leitor num drama de intimidade também. O sol cuja luminosidade ilumina a sua mesa de trabalho permite-nos sentir uma revelação vindoura. Essa revelação ocorre precisamente no último verso do poema "Evolution": "Then I saw you walking on the hill". Afinal de contas, todo o poema desemboca na experiência extática do visionamento da companheira. Este "you" aparece ao modo de uma revelação, a epifania da bem amada. É a coroação lírica, porém, de toda uma série de dramas entre eus e tus, entre insectos em pleno acto de sedução hormonal, entre o olhar do naturalista e o coração do amante, entre o observar científico e a visão extática. Tudo no poema comunica a relação entre uma criatura pensante e o universo como sendo a de uma revelação amorosa contínua.

O poeta sabe – sem nunca tê-lo aprendido directamente de ninguém (antes por aturada convivência com as coisas cuja muda inteligência ajuda a guiar o seu lento processo de autoconhecimen-

to) – que a palavra é ao mesmo tempo ferramenta (de descoberta, de descrição ou, até, de poética transposição metafórica a fim de estender todo o acto de significação) bem como um estado de discernimento excepcional: o mundo renasce na folha de papel, ou no ecrã do computador, ou, ainda na translucidez de uma cognição extática. Num momento de suprema excitação dialogante com o mundo, o poema faz com que a inteligibilidade do mundo emerja como novo horizonte enigmático e instância de (urgente) comunicabilidade. No acto de escrever o poema, o mundo adquire uma nova forma de concretização, uma nova dimensão de visibilidade para um ser que nasceu vocacionado para alargar continuamente os seus territórios de reflexão e actuação. O poema fornece um mapa de indagação fora da topografia mítica daquele jardim perdido.

Hoffmann, o poeta, vocacionado para o diálogo entre o saber das moléculas e a urgência das palavras, sabe que tudo o que realmente merece a nossa atenção reside fora dos confins da percepção habitual. O léxico especializado do cientista é como um dissolvente que elimina as imprecisões presentes no que é mais toscamente empírico; a dicção do poeta, por sua vez, não é uma pose nem uma artificialidade verbal, mas, sim, fruto da sua tentativa de trazer à superfície linguística do seu poema uma apreensão intensificada do vivencial. Haverá especialização em termos de linguagem poética? Sim, mas, paradoxo!, apenas na medida em que a linguagem poética *não renega* a linguagem ordinária normalmente empregue por nós ao descrevermos as nossas experiências quotidianas. A linguagem poética não é distinguível da linguagem ordinária, não possui um léxico diferente nem patenteia necessariamente um conteúdo metafórico estatisticamente mais elevado em relação à linguagem que empregamos para descrever, por exemplo, o tempo ou as actualidades políticas. A poesia não impõe uma lei própria que seja incomensurável com a linguagem da praça pública ou do *boudoir*: a poesia simplesmente torna radicalmente visível os *partis pris* da comunicação quotidiana. A poesia não se escamoteia da

realidade quotidiana nem a sublima em sofisticadas alquimias verbais; *a poesia devolve-no-la*. A poesia pertence ao passado e ao futuro do mundo; é um dos modos que possuímos para autenticamente habitar a Terra. Ao surgir o primeiro poema da humanidade, o ser humano e os seus amigos e adversários entenderam o mundo não como pura presença dada ou imediata, mas, sim, como presença conquistada, como superfície deslumbrante, como texto iminentemente legível. Só assim, nos milénios de existência desta criatura pensante, no suceder de gerações sucessivas deste ser complexo, no regenerar e degradar das suas culturas, etc., é que o mundo nunca se tornou decrépito; o poema é, à semelhança da luz, uma medida intransponível, uma velocidade mental, um evento de compreensão inaugural. O poema é, afinal de contas, um pedaço de imaginação genesiaca: o que nasce com ele é uma compreensão renovada da nossa condição histórica e cósmica.

Daí a significância, parece-nos, do subtítulo que Hoffmann atribui à sua primeira colectânea de poemas, *The Metamict State*, em que define o termo "metamict" mediante as seguintes palavras que aqui traduzimos para português: "um estado pouco usual da matéria, amorfo devido ao facto de haver a ruptura da estrutura cristalina provocada por radiação proveniente de átomos radioactivos contidos ou próximos". Friamos a característica pouco usual e amorfa deste estado: um estado que nos parece servir de modelo metafórico para o acto de escrever poesia em si, i.e., a poesia interpela a nossa consciência historicamente formada de um modo pouco usual, criando uma profunda perturbação ao nível da sua estrutura normal. O estado "metamict" define uma maneira excepcional de incidir sobre o mundo: num evento de mutação radical, o real é reconfigurado (ornado momentaneamente "amorfo" em relação à sua compreensão habitual) e revela nova significação. Será que Hoffmann nos estará a confidenciar uma convicção de poeta? Ou seja, que a poesia e a ciência representam modos diversos mas profundamente aparentados

de aproximação ao real? Nenhuma linguagem específica, quer das ciências naturais, quer das ciências humanísticas, reproduz o mundo em saber fixo e permanente: no diálogo entre a mente e a matéria, entre um ser pensante e a tradição de reflexão a que historicamente pertence, tudo se torna "metamict". O poeta e o cientista aumentam a nossa capacidade de vermos e de nos vermos: fazem da nossa ignorância crónica uma opacidade viva. Aumentam a nossa capacidade de nos surpreendermos. Quer dizer: no exílio antigo que nos afastou do Éden mítico, confrontamo-nos com o desamparo divino, com o desenraizamento sentido no fundo do nosso ser, lá onde descobrimos precisamente não só uma vocação mas também a nossa liberdade.

O Jardim de hoje em dia tem também a sua árvore de conhecimento do Bem e do Mal. Hoje, porém, persistimos em comer a fruta desta árvore. Porque assim o devemos fazer. O território que este jardim encerra é o do nosso olhar consciente; somos, como diz Hoffmann, os seus jardineiros. E o que chegamos a conhecer representa um misto de teoria, acto, desconsolo e êxtase. Cada dia inauguramos uma conversa com aquilo que não compreendemos, que não se nos entrega de modo imediato. (Neste Jardim, a serpente – que adivinhou o nosso desejo de saber – representa a resistência, não a tentação!)

Final nunca perdemos o Jardim; levamo-lo connosco.

Anexo

1. "A Diferença entre a Arte e a Ciência"

Deste quadro de Munch,
retrato de um ser angustiado numa
[ponte,

as mãos cobrindo as orelhas, o observador
poderia raspar uma amostra cor de laranja

do tamanho de um micron. Poderia a
[seguir
colocá-la numa lamela, afinar então

os velozes raios de luz que orbitam
por debaixo dos parques de estaciona-
[mento e dos campos de

futebol, e, incentivados pelo empurrão
imaterial do imã, por fim
[fazer incidirem, pois é esse

o seu ofício, as partículas da sonda
(sofisticadas pedras calibradas)

na amostra de pintura, até elas inscre-
[verem
o seu impacto violento. A busca

cinge-se a este determinar da força do
[grito.

Mas o sondar das partículas resulta

demasiado violento – elas perturbam e
[desamarram
as moléculas da pintura demonstrando,

manifestamente o princípio de incerteza.
Eis o quadro suspenso;

céu e cais noruegueses
repercutem o grito, projectam-no qual
[luz

Para dentro do crânio do observador.
Ali, em eco, efectuam uma transformação.

(Roald Hoffmann, *The Metamict State*, Orlando: University of Central Florida Press, 1987, 89) (tradução nossa)

2. "Perscrutadores e Determinadores"

Começa-se por tirar amostras, escolhendo
as excrescências da abundante Natureza
e, a seguir, escutam os insistentemente
[o código

pulsante que sai do nosso tambor de
bricoleur. Associar-

-lhe uma equação diferencial, simular,
reduzir... ah, isso tudo é
[termos poder,
domínio, e,
afinal de contas
nada difícil,

pois alguns de nós,
desde a nossa juventude dotada,
aprendemos muito bem as nossas lições.

Os padrões pulsam ininterruptamente,
[logo revelados

a ouvidos afinados em Osaka
e Heidelberg, bem como em Ítaca.

Ei-nos portanto, heróis pouco
carismáticos do mito do progresso
Oh!, como gostamos de nos pavonear
[uns diante

de outros, nas filigranas
das nossas linguagens, nos entrelaçados
que traçamos sobre um caos desmas-
[carado.

Mas o mundo inventou ainda outros
bem indispensáveis participantes do
[drama,
guardiões de homens e de bens,

assassinos, protectores e guerreiros.
Aqueles que determinam o momento,
Ora de curar, ora de matar, ora de com-
[primir

o nosso saber a fim de potenciar as suas
ferramentas.

As nossas ferramentas.
Aqueles que administram, de boa vontade
e de vez

em quando
deitam bombas
e matam lagos prístinos pela caminho.

E se acharmos que aqueles governam
O mundo sem sensatez, afirmo que
nós não faríamos melhor.

Alguns dos perscrutadores têm dúvidas:
Temos nós afinal culpa por ter, com a
sabida precisão da agitada dança dos
[electrões

nas suas redes cristalinas, libertado no
mundo os segredos dos raios, lâminas,
as rodas dos tanques com que *aqueles*
[forjam

o fim do mundo? Postulamos então, sem
[irmos
mais longe na nossa consciência, que
[essas
melodias e piroetas pela mente

e a matéria poderiam antes ter sido
permitidas continuar informúladas,
[inexploradas

e nós assim sairíamos os beneficiários.
Mas não, não. Os *ur-segredos* da Natureza não existem passivamente. Crescem na mente como erva,

estrangulam-nos com a sua iminência ao passo que nós somos as ferramentas
[do jardineiro –
a Natureza – que assim no-los confi-
dencia.

Estes segredos não ficarão jamais ocultos. E assim... quem dá alimento e quem
[vende,
os sacerdotes e os governadores, todos
[a nós

nos escolheram para personagens
[numa tragédia. Em
exaltada loucura alimentada pela erva
[de tudo o que
aprendemos, aprendemos também,
[desprovidos de escolha,

aquilo que porventura irá fazer-nos mal. É-nos inerente a dor de saber, conhecer, o orvalho iluminado

do rebento serpentino
do feto,
no instante de se desdobrar,
de se desocultar
já pronta para nos consumir.

(Roald Hoffmann, *The Metamict State*, 55–57) (tradução nossa)

3. "Next Slide, Please"

there was no question that the reaction
[worked
but transient colors were seen
in the slurry of sodium methoxide in
[dichloromethane
and we got a whole lot of products
for which we can't sort out the kinetics
the next slide will show
the most important part
very rapidly
within two minutes
and I forgot to say on further warming
we get in fact the ketone
you can't read it on the slides
but I refer to the structure you saw before
the low temperature infrared spectrum
as I say
gives very direct evidence

so does the NMR
we calculated it
throwing away the geminal coupling
which is of course wrong
there is a difference of 0.9 parts per mil-
[lion

and it is a singlet
and sharp
which means two things
either
you're doing this NMR in excess metho-
[xide

and it's exchanging
or
I would hazard a guess
that certainly in these nucleophilic
[conditions

there could well be
an alternative path
to the one enone you see there
it's difficult to see
you could monitor this quite well in the
[infrared

I'm sorry in the NMR
my time is up I see
Well this is a brief summary of our work
not all of which
I've had time to go into
in as much detail as I wanted
today.

(Roald Hoffmann, *The Metamict State*, Orlando: University of Central Florida Press, 1987-89, 51–52)

4. "Evolution"

I had written three pages
on how insects are such good chemists,
[citing
the silkworm sex attractant,
and the bombardier beetle,
spraying out hot hydrogen peroxide
[when threatened.
And I was in the middle
of telling the story of the western pine
[beetle,
which has an aggregation pheromone
calling all comers (of that species).
The pheromone has three components:
one from the male, frontalin,
exo-brevicomin wafted by the female
and (ingenious)
abundant, pitch-smelling myrcene
from the host pine.
I had written this the night before,
broken it down into short lines.

When I woke up Sunday and sat down
[to work,
quietly, with a second cup of coffee,
the sun was on my desk.

I had some flowers I had picked on the
[hill
in a vase: bush lupine, California pop-
[pies,
and some of the grass that grows here.
On the grass stalks the bracts were a few
[centimeters apart.

They were beige, finely lined husks,
their line set by a dark spikelet,
more like a stiffened flagellum than a
[thorn.

A hint of something feathered inside.
The sun's warmth had burst some of the
[pods,
which had fallen on the draft
(the words were lost in the sun), fallen
by chance next to the shadows of seed
[still hanging, and,

the grass seed,
like dormant grasshoppers,
legs of now bent spikelets
cast second, finer shadows.
Then I saw you walking on the hill.

(Roald Hoffmann, *Gaps and Verges*, Orlando: University of Central Florida Press, 1990, 3)

5. "Conversa com a pedra"

Bato à porta da pedra.
– Abre. Sou eu.
Quero entrar dentro de ti,
Olhar tudo ao meu redor,
respirar-te.

– Vai-te embora – diz a pedra.
Estou hermeticamente fechada.
Mesmo feitas em pedaços
estamos hermeticamente fechadas.
Mesmo em areia desfeitas
não abrimos a ninguém.

Bato à porta da pedra.
– Abre. Sou eu.
Venho por pura curiosidade.
A vida é a única ocasião para a satisfazer.
Tencionava passar pelo teu palácio
e depois visitar ainda a folha e a gota de
[água.

Não tenho muito tempo para isto tudo.
O meu ser mortal devia comover-te.

– Sou de pedra – diz a pedra –

impossível perturbar a minha seriedade.
Vai-te daqui.
Faltam-me os músculos do riso.

Bato à porta da pedra
– Abre. Sou eu.
Ouvi dizer que há em ti grandes salas
[vazias,
nunca vistas, belas em vão,
mudas, sem o eco dos passos de
[ninguém.
Reconhece que tu própria pouco sabes
[disso.

– Grandes salas e vazias – diz a pedra –
só que lá não há lugar.
Belas, talvez, mas de beleza inacessível
aos teus pobres sentidos.
Poderás reconhecer-me, mas nunca me
[conhecerás.
Em toda a superfície me volto para ti,
mas o meu interior volta-te as costas.

Bato à porta da pedra.
— Abre. Sou eu.
Não procuro em ti eterno asilo.
Não me sinto infeliz.
Não sou um sem-abrigo.
O meu mundo é digno de regresso.
Hei-de entrar e sair de mãos vazias.
E como prova real de ter estado,
não apresentarei senão palavras
a que ninguém dará crédito.

– Não entras – diz a pedra.
Falta-te sentido de participação.
E nenhum outro sentido pode substituí-lo.
Nem um olhar omnividente
te servirá de nada sem esse sentido.
Não entras. Em ti esse sentido é vaga
[intenção.
Vago o seu germe, a sua concepção.

Bato à porta da pedra.
– Abre. Sou eu.
Não posso esperar dois mil séculos
para me recolher ao teu telhado.

– Se não acreditas em mim – diz a pedra –
vai ter com a folha, dir-te-á o mesmo.
Com a gota de água e o mesmo te dirá.
Pergunta por fim a um cabelo da tua
[própria cabeça.
Estou prestes a rir às gargalhadas
de rir como a minha natureza me
[impede de rir.

Bato à porta da pedra.
– Abre. Sou eu.

– Não tenho porta – diz a pedra.

(Wisława Szymborska, *Paisagem Com Grão De Areia*, trad. Júlio Sousa Gomes, Lisboa: Relógio D'Água, 1998, 56–63)

Notas

1 Wisława Szymborska, *Paisagem Com Grão De Areia*, trad. Júlio Sousa Gomes, Lisboa: Relógio D'Água, 1996, 59, 61.

2 Roald Hoffmann, *The Metamict State*, Orlando: University of Central Florida Press, 1987, 56-57. (tradução nossa)

3 Paul Tillich, o teólogo protestante de origem alemã, proporciona-nos, numa célebre conferência intitulada "Fronteiras", uma síntese excelente desta nossa situação moderna:

A força tremenda da ideia progressista enraizara-se, em primeiro lugar, na verificação de existirem exemplos de progresso no que respeita ao domínio técnico e científico. Mas esta verificação era inadequada, e o que agora nos incumbe é a demonstração dos elementos não-progressistas vigentes na realidade e na cultura. (...) O princípio geral que se aplica aqui é: onde existe a liberdade de contrariar a realização do nosso ser, é precisamente onde se quebra a lei do progresso. A liberdade que tem o ser humano de contrariar a sua própria autorealização plena quebra a lei do progresso. Esta liberdade não é senão o acto moral, actualizado todos os dias inúmeras vezes. Não há progresso no que respeita ao acto moral precisamente porque não existe nenhuma moralidade sem haver concomitantemente decisões livremente tomadas; sem a consciência do nosso poder de traírmos e descentrarmos o nosso ser. Significa isto que cada indivíduo representa um começo e deve tomar decisões morais por mais ou menos culto que seja. A rebarbarização do povo alemão [durante o regime nazi] era incompreensível para aqueles que se aliavam a uma fé no progresso.

(in *The Future of Religions*, (O Futuro das Religiões), ed. Jerald C. Brauer, New York: Harper & Row, Publishers, 1967, 71.)

4 É curioso notar que ambos cientistas começaram a publicar a sua poesia já depois de terem orçado os cinquenta anos de idade. Ambos produzem uma poesia cunhada numa linguagem de notável destilação que ironiza precisamente a fronteira entre

linguagens ou modos de aproximação ao real considerados divergentes e, até, irreconciliáveis, nomeadamente, a fronteira considerada intransponível entre a ciência e a literatura. Ambos são autores de poemas que questionam a ideia de uma radical resistência entre os vários modos de aproximação. Não antes, porém, de acentuar, quase até ao ponto de ruptura, as suas reais diferenças. São nitidamente poetas da fronteira e do interstício, portanto. Onde não há fronteira, não há diferença, mas também, sem a fronteira, não há nem comunicação nem resistência reveladora.

5 in Roald Hoffmann, *Gaps and Verges* (Lacunas e Bordas), Orlando: University of Central Florida Press, 1990, 3. Apresentamos os excertos deste poema na sua língua original devido à complexidade lexical e à lógica sincopada da sua sintaxe. Futuramente, esperamos poder preparar uma antologia de poemas de Hoffmann em tradução portuguesa.

Nota Biográfica

Roald Hoffmann nasceu em 1937, numa cidade que pertencia então à Polónia (actualmente à União Soviética). Fugindo à ocupação nazi e, após vários anos de existência instável passada viajando pela Europa fora, consegue emigrar, junto com a sua mãe e o padrasto, para os Estados Unidos em 1949. Doutorou-se em Física Química pela Universidade de Harvard, lecciona e investiga na área de química teórica na Universidade de Cornell desde 1965.

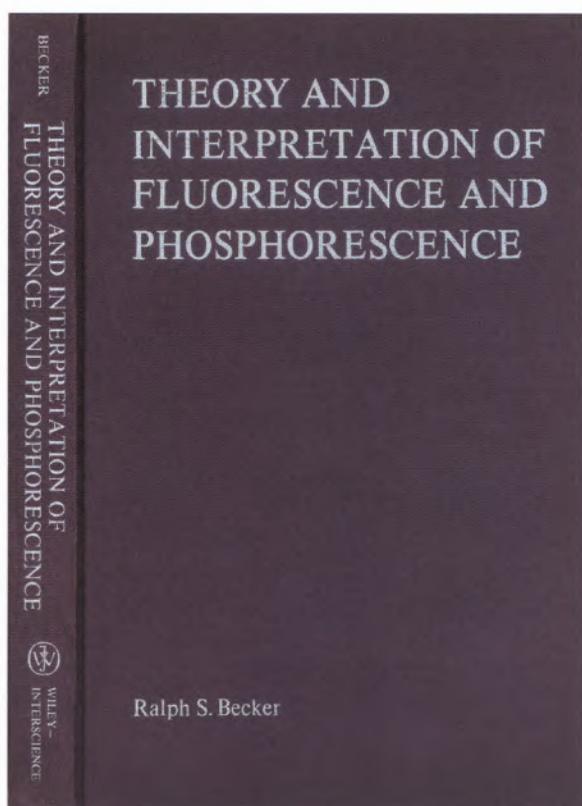
As suas áreas de investigação são múltiplas, uma actividade multifacética que lhe granjeou vários prémios, incluindo o Prémio Nobel de Química de 1981, que partilhou com Kenichi Fukui. Hoffmann interessa-se particularmente pela geometria e pela reactividade das moléculas bem como pela tentativa de explicar as estruturas das moléculas mediante o cálculo das trajectórias dos electrões destas moléculas. Agrada-lhe designar esta amálgama de cálculos gerados experimentalmente junto com a construção de modelos generalizados como sendo uma "química teórica aplicada".

Hoffmann começou a publicar poemas nos anos oitenta, tendo publicado a sua primeira colectânea de poesia em 1987.

Theory and Interpretation of Fluorescence and Phosphorescence

Ralph S. Becker

FERNANDO PINA *



A minha relação que se pode dizer, de amor por este livro, começou no já longínquo ano de 1975. Para se perceber bem a história deste amor, precisamos introduzir o leitor no clima pré e pós 25 de Abril de 1974. Tinha sido incorporado no serviço militar em Abril de 1973. Ir ou não ir combater uma guerra que considerava injusta era o meu dilema e o de tantos jovens que haviam tomado consciência do problema colonial. O 25 de Abril foi para mim duplamente libertador. Resolveu o meu dilema e permitiu-me, pela primeira vez em tantos anos,

dormir em sossego, sem receio de um dia alguém se lembrar de me arrastar para uma qualquer prisão política, como vi acontecer a amigos íntimos. Foi numa bebedeira de liberdade que vivi o 25 de Abril, precisamente quando estava em férias de mobilização para Moçambique. Vivi esse dia memorável na rua e a partir do dia seguinte, interrompidas as férias, como Oficial Miliciano do Exército, em tarefas de segurança da Televisão, e mais tarde na protecção de uns computadores de um serviço social, do qual não me recordo o nome, ali ao Campo

Grande. Como disse, o 25 de Abril resolveu o meu dilema. Já não havia motivos para não ir para Moçambique. Agora a nova missão do Exército Português era fazer a paz e não a guerra.

No saco de militar, que fazia as vezes de mala de viagem, levava um livro elementar de fotoquímica que, uma vez instalado no norte de Moçambique, ia tentando ler. Mas devo dizer que foi um período pouco propício ao estudo. À medida que o Exército Português passava o testemunho à FRELIMO, e nos locais onde estive, tudo foi feito com ordem, dignidade e alguma tranquilidade, assim nós íamos descendo aquele País, primeiro para a cidade da Beira e depois para a capital Lourenço Marques, actual Maputo. Aqui estive cerca de três meses. Não fosse a ânsia do regresso a casa, que tardava, foi o melhor período da minha estada nessas paragens. Havia bons cinemas, restaurantes, cafés, tinha por lá alguns amigos, feitos noutras paragens, tempos e lides, e havia... livrarias. Um dia entrei numa delas, e qual não é o meu espanto, ao deparar com uma série de livros científicos, nomeadamente excelentes livros de espectroscopia, que em Portugal não se encontravam à venda, e era uma dificuldade enorme encomendar, com cheques para aqui, cheques para ali, etc... Foi assim que peguei naquele que entre nós é conhecido como "o livro do Becker", mas de seu nome completo "Theory and Interpretation of Fluorescence and Phosphorescence". Foi escrito por Ralph S. Becker, e publicado pela Wiley-Interscience, em 1969.

Tenho uma especial afeição por este livro, que já me acompanha há mais de metade dos anos que leva a minha vida.

Mas a história não fica por aqui. Em meados dos anos oitenta, ainda trabalhava no CQE, a Prof.^a Sílvia Costa, que juntamente com o Prof. Romão Dias foi minha supervisora da tese de doutoramento, entrou no laboratório muito excitada, dizendo que vinha aí um professor americano muito importante, passar uma sabática no seu laboratório. E disse um nome, o Prof. Becker. Naquela altura não liguei o nome ao livro, não estaria à espera, mas logo compreendi de quem se tratava.

O Prof. Becker foi uma referência para várias gerações de fotoquímicos portugueses e, felizmente, ainda podemos contar com a sua contribuição. Nunca publiquei nenhum artigo com ele, mas há muitos anos ajudou-nos imenso na definição da nossa carreira científica. Sei que outros colegas, como o Prof. António Maçanita, do Técnico, e o Prof. João Seixas de Melo, do Departamento de Química da Universidade de Coimbra, continuam a colaborar com ele e a publicar artigos de grande qualidade e impacto científico. Só para dar um exemplo, o artigo "Comprehensive evaluation of the absorption, photophysical, energy trans-

fer, structural, and theoretical properties of alpha-oligothiophenes with one to seven rings", por R. S. Becker, J. S. Melo, A. L. Maçanita, F. Elisei, *J. Phys. Chem.* **1996**, 100, 18683–18695, leva neste momento 92 citações, segundo dados da Web of Science.

O objecto deste amor tem capa roxa e um título com letras prateadas. E está escrito de um modo condensado, mas simples, e ainda hoje não perdeu a sua actualidade. No meu exemplar são visíveis as marcas do tempo. Mas nem por isso o meu amor por ele diminui, antes pelo contrário, está mais frágil e tem de ser tratado com mais carinho.

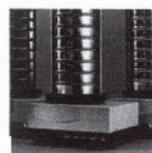
Retsch



Moinhos



Agitadores de peneiros/peneiros



Divisores de amostras



Análise granulométrica automática CAMSIZER / CRYSTALSIZER



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

21-352 72 93

22-618 42 32

O Importador Exclusivo

LISBOA

PORTO

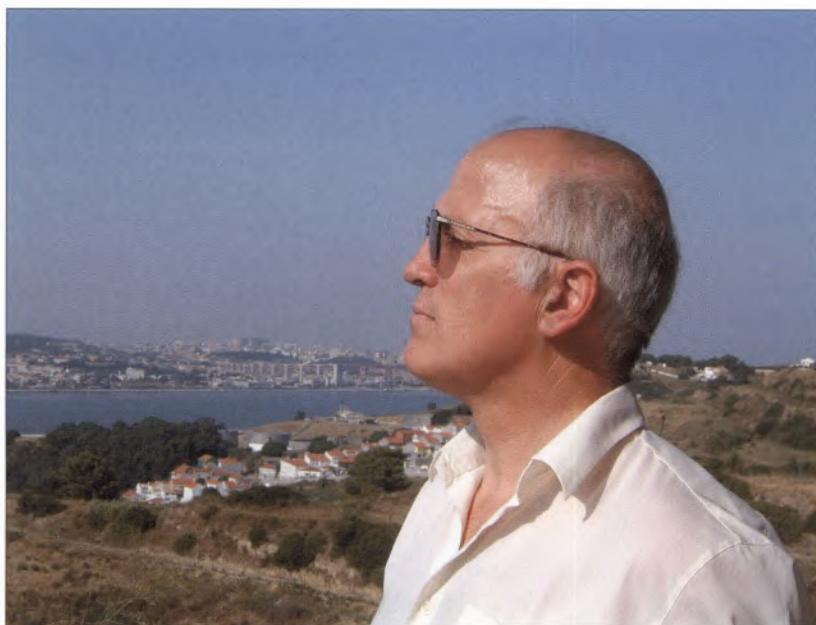
Campo Mártires da Pátria, 109

Rua do Vilarinho, 1235 • 4100-517, Porto

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

Prof. Luís Sousa Lobo

CONDUZIDA POR F. PINA E MARIA JOÃO MELO



Em resposta a uma pergunta que poderia ser entendida como uma velada crítica ao Campus do Monte de Caparica, o Prof. Sousa Lobo guiou-nos, num passeio pedagógico de quase duas horas, pelos cerca de 53 hectares do Campus. E na frente norte, no alto da colina, com o Tejo a nossos pés, Lisboa a mostrar-se vaidosa, a Torre de Belém, os Jerónimos e a Ponte como referências, à sombra de um pinheiro altaneiro, veio finalmente a revelação de um tesouro escondido. Cheio de colinas verdes da reserva ecológica, e os cheiros do matagal. E o circuito de manutenção a inaugurar em breve, e o projecto da pista de ciclismo. E nem nós, que aqui vivemos o dia a dia, nos tínhamos apercebido daquilo que estava escondido do outro lado da estrada, que uma ponte em breve há-de unir. É com uma paixão contida que o Prof. Sousa Lobo descreve um projecto,

ao qual deu o seu melhor, e para o qual se continua a bater no terreno. E no meio do ainda mato, surgem as imagens de um Campus cheio de espaços verdes virados ao Tejo, dos anfiteatros com vista para o rio, etc...sabe bem sonhar, ainda mais quando o sonho se está já a realizar!

No seu curriculum vitae está escrito que nasceu na fábrica Cimento Tejo em Alhandra. Será que se pode encontrar nesse facto a razão mais profunda pela qual se tornou Engenheiro?

Penso que nós escolhemos a nossa vocação por várias razões complexas, em que a parte familiar e a parte cultural da infância têm incidência, mas também os aspectos cognitivos, as áreas em que a pessoa se movimenta com à vontade. Não tenho dúvidas nenhuma que no meu percurso certamente estaria uma

engenharia, dadas as minhas inclinações e dado que o meu pai era Engenheiro Civil. A razão porque escolhi Engenharia Química foi bastante accidental, quase anedótica.

Que aspectos curiosos intervieram na sua escolha da Química ?

Foi aleatória, foi exactamente aleatória. Fiquei orfão de pai aos 11 anos. Vivíamos com algumas dificuldades. O meu irmão mais velho foi para Engenharia Química (depois acabou por formar-se em Química). Como ele tinha ido para Engenharia Química era conveniente que eu também fosse, para ter os livros dele, porque ficava mais barato. Eu sabia que ele tinha também ido para Química por uma razão prática. Um amigo dele chamado Pedro Lagido tinha decidido ir para Engenharia Química, e assim iam os dois juntos. Falta saber porque é que o Pedro Lagido escolheu Eng.^a Química... Devo dizer contudo que naquele tempo era já um curso de prestígio, escolhido regularmente pelos melhores alunos de vários liceus e colégios bem cotados.

Mas arrependeu-se da escolha?

Não, não estou arrependido. Mas penso que teria realizado uma melhor carreira noutro ramo de Engenharia, porque a Química tem uma componente de memória mais sistemática e a minha memória é muito racional, funciona ligada mais à lógica e ao raciocínio. A Química é muito elegante, mas eu não me movimento tão à vontade na Química como me movimentaria, provavelmente, na Engenharia Civil, na Mecânica ou na Electrotécnica.

O Colégio Militar onde fez o ensino secundário, deixou-lhe laços profundos. E na sua lapela figura muitas vezes o emblema dessa instituição. Sendo assumidamente um homem de paz, não encontra nesses seus afectos alguma contradição?

Nem pouco mais ou menos. Eu fui ver a semana passada a peça “Copenhaga”, pela segunda vez aliás. A peça é um registo muito interessante por ser uma recordação do que se passou num encontro entre o Heisenberg e o Bohr em 1941, mas recordado sucessivamente em tempos diferentes; à medida que há uma nova recordação, as coisas reaparecem a uma nova luz. Eu acho que se aplica aqui mais ou menos o mesmo. O Colégio Militar fez este ano duzentos anos da sua fundação. Ao fazer agora a releitura da minha experiência do Colégio Militar, e a releitura da própria tradição e percurso histórico do Colégio Militar, redescobri várias coisas. O fundador do Colégio Militar foi o Marechal Teixeira Rebelo, uma figura muito presente no espírito do Colégio. Há algumas tradições ligadas ao seu busto, que está à entrada. O Marechal Teixeira Rebelo era transmontano e não tinha descendência. Julgo que há valores de raiz transmontana que estão no espírito do Colégio Militar, particularmente a lealdade e a camaradagem. Por outro lado, o Colégio foi fundado em 1803. O impacto e as ideias da Revolução Francesa estavam muito presentes. O Colégio Militar foi marcado à nascença por simbiose de alguns sólidos valores nacionais com ventos da Revolução Francesa. Os valores da liberdade, da igualdade e da solidariedade, estão também muito presentes nas tradições do Colégio. O Colégio Militar é uma escola de liberdade e responsabilidade e formou alguns grandes vultos e notáveis rebeldes, como o António Sérgio, Eduardo Lourenço ou Almeida Negreiros, e não apenas militares destacados como Carmona, António de Spínola, ou Costa Gomes.

Então porque razão saiu do Colégio Militar para ir fazer Engenharia Química no Técnico?

O Colégio Militar é uma boa escola de ensino secundário, mas nunca esteve

no meu espírito fazer uma carreira militar. Tive uma série de muito bons professores no Colégio, de Física e Matemática em particular. Em Português tive aos 13 anos um professor que me entusiasmou muito; ele obrigava-nos a enriquecer o vocabulário com palavras novas; tínhamos, por exemplo, de construir uma redacção com tema livre mas utilizando vinte ou trinta palavras novas numa lista. E decorávamos textos e poesias. Lembro-me de andar com o Gonçalo Lucena, a decorar e a declamar ao despique! Ainda hoje sei para aí vinte ou trinta poesias portuguesas importantes, que decorei nessa altura. Tive também um professor de matemática que me marcou, o Roseiro Boavida. Quando fui para a carreira universitária, para Lourenço Marques, e me fui despedir dele, disse-me que eu tinha sido “o seu aluno mais”. Sei que disse a outras pessoas que eu tinha sido o seu aluno preferido. Eu deduzia algumas fórmulas e depois ele ia ver aos livros se aquilo estava certo, entusiasmava-se comigo e motivou-me bastante.

Mas em Física, por exemplo, também tive excelentes professores. Lembro-me que no exame prático do 5.º ano, em Física, me deram uma pequena peça de metal e pediram-me que determinasse a sua densidade, o que nunca tínhamos feito. Ali, durante o exame, peguei num picnómetro, pesei, fiz os cálculos, etc, e determinei a densidade com uma precisão suficiente para ter uma boa nota.

A sua carreira de Engenheiro teve início na CUF, no Barreiro...

Exactamente.

O que era ser Engenheiro da CUF no Barreiro nos anos 60? Quais os projectos que aí desenvolveu? De que forma essa experiência o influenciou?

A empresa, a Companhia União Fabril, tinha um figurino parecido com as empresas japonesas, com pendor paternalista. As pessoas entravam na empresa e ficavam a pertencer à “família”, mas era uma escola excepcional, do ponto de vista profissional. Formava as pessoas, havia valores e muito profissionalismo. Fiz paralelamente o serviço militar como Engenheiro Químico, no único

lugar que existia para funções genuinamente de Eng.ª Química, a fabricar pólvoras químicas, nitroglicerina, nitrocelulose, etc. Na CUF, estava como Engenheiro de processo. Estudava os processos, fiz uma série de inovações, mas não estava ligado à produção, não fazia turnos. Inventei uma série de coisas novas, a maioria visando a “despoeiração” das fábricas. Uma que me deu muito gosto na altura, foi resolver um problema de cálculo de trajectória da descarga de telas transportadoras. As telas transportavam sólidos, em particular adubos granulados e matérias primas a granel, e nessa trajectória havia em muitos casos uma desfasagem muito grande, para aí de 100%, entre a trajectória real e o que a teoria previa. Um dia tive uma intuição, utilizei resultados de laboratório que já tinha, testei a ideia, e aquilo bateu tudo certo. Enviei para o *British Chemical Engineering*, que aceitava contribuições curtas com solução de problemas reais, e com dois níveis de retribuições, conforme o mérito. Foi publicada imediatamente e dos dois níveis de retribuição tive o mais elevado. Isso correu lá na CUF e deu-me um gosto particular. Quando me despedi, para ir para a Universidade de Lourenço Marques, para a carreira universitária, julgo que ia passar, dentro da CUF, de Engenheiro de processo a Engenheiro de produção.

E já que falou de Lourenço Marques, actual Maputo, o que é que motivou um jovem europeu, a ir para terras tão distantes?

Foi bastante óbvio. Digamos que eu tinha falhado dois convites para ser assistente do Técnico...

...Falhado porque recusou?

Vou explicar. E esta foi uma terceira oportunidade, por concurso. No quarto ano do Técnico eu fui convidado pelo Prof. Loyd Braga, para assistente de Física Atómica. Tinha tido 17 valores a Física Atómica, a nota mais alta, mas como era dirigente de uma associação que era a JUC¹, o Director, vetou. Eu não sei se ele vetou porque já tinha tido muitos sarilhos com dirigentes associativos, ou vetou porque consultou alguma ins-

tância externa que deu informação desfavorável. Mas o que acontece é que ele vetou. Depois, exactamente quando terminei o curso, o Prof. Loyd Braga voltou a convidar-me, mas eu tinha ao mesmo tempo o convite da CUF e fui falar com o Manuel Fernandes Tomás, de quem já era amigo nessa altura, e perguntei-lhe – o que é que eu faço? E ele disse-me: – olha se vens aqui para a carreira universitária, ficas cá e nunca mais saís daqui. Se fores para a indústria, tens essa experiência e se te acontecer depois querer vir para a carreira universitária, estás sempre a tempo. Eu segui esse conselho, tive três anos na indústria, que foram uma experiência preciosa. Depois o Loyd Braga, tendo sido convidado pelo Veiga Simão para ir para Lourenço Marques pôs um anúncio na vitrine, no Técnico, e eu nessa altura respondi a esse anúncio, com mais, não sei, talvez dez ou quinze pessoas. Ganhei, e em segundo lugar ficou o Lício Chaiño Pereira, que também foi recrutado. Deu-se a coincidência de termos ido para Lourenço Marques no mesmo dia e termos regressado de Lourenço Marques também no mesmo voo, no final de 1974.

E o projecto da Universidade de Lourenço Marques de quem era? Quem o liderava?

Era o Veiga Simão; trabalhava muito em equipa, descentralizava e motivou muito as pessoas. Tinha o modelo da Universidade Anglo-Saxónica, com base Departamental, etc, e conseguiu atrair muitas pessoas de qualidade, inicialmente de Coimbra, mas depois também do Porto e do IST. Quando eu fui seleccionado, o Simões Redinha era o Director do Departamento de Química, e a correspondência que tive foi com ele, mas quando cheguei a Lourenço Marques, em Janeiro de 1977, o Redinha já não estava lá, porque já tinha terminado a comissão de serviço e tinha regressado a Coimbra. Estava lá o Victor Pereira Crespo. O meu primeiro Director de Departamento foi pois o Victor Crespo, que mais tarde foi Ministro da Educação e Presidente da Assembleia da República. Aliás, a primeira cadeira que fui dar eram as práticas de Química-Física,

sendo o regente o Victor Crespo, que se tinha doutorado em Berkeley.

E como era lá a vida universitária?

Era muito interessante; era naturalmente uma terra com limitações, mas a cidade estava muito bem desenhada, muito bonita, e era uma cidade com muito associativismo, muitos clubes, muita vida cultural; na própria universidade havia vida cultural. Lembro-me de um grupo de teatro informal, que contava, como organizadores e actores, com o Manuel Fortes e o Augusto Novais. No plano Universitário, embora os meios fossem limitados, as coisas eram feitas com bastante profissionalismo. Embora com meios modestos, havia progressos tão marcados de ano para ano que era um gosto.

Mas havia já investigação?

Ah sim! Havia investigação. Posso ilustrar com a minha experiência. A conversa que tive com o Veiga Simão, antes de entrar para a Universidade de Lourenço Marques, foi num hotel que fica junto ao elevador da Glória. Ele hospedava-se sempre nesse hotel. As coisas já estavam decididas, mas fui lá para o conhecer pessoalmente. Ele disse-me logo nesse primeiro encontro: — está dois anos na Universidade de Lourenço Marques e depois vai para doutoramento. Todas as pessoas que fossem assistentes em Lourenço Marques, passado dois anos iam para doutoramento no estrangeiro. Quando estava a terminar o doutoramento em Londres, tinha entrado uma fornada de novos assistentes, um deles era o João de Deus Pinheiro, outro o Carlos Bernardo. O Carlos Bernardo escolheu a catálise como tema para se doutorar, e portanto o Joaquim Barbosa Romero colocou-o sob a minha alçada. O Carlos escreveu-me, mas não nos conhecíamos pessoalmente. Correspondi-me com ele e mandei-lhe uma lista de equipamento que deveria ser comprado. Acabei o meu doutoramento em meados de 1971, mas consegui ficar em Inglaterra ainda mais 6 meses para fazer um post-doc, pois tinha terminado o doutoramento em 2 anos e meio. Quando aterrei em Lourenço Marques, em Março de 1972, já estavam a chegar

os equipamentos. O Carlos Bernardo era muito organizado e já tinha mandado vir o material. Em dois ou três meses montámos tudo, e o Carlos ainda esse ano começou a fazer trabalho experimental para a tese, mas passado dois anos veio a revolução de Abril e a independência. Só tivemos lá dois anos e meio, mas saíram dali três ou quatro artigos científicos publicados nas melhores revistas. O Carlos Bernardo não pôde terminar lá o doutoramento, foi terminá-lo em Londres. É um caso curioso, em que a tese é da Universidade de Londres, mas mais de metade dos resultados são de trabalho feito em Moçambique.

Tanto quanto a propaganda do regime Salazarista e depois Marcelista proclamava, as novas Universidades nas então denominadas Províncias Ultramarinas, teriam como objectivo criar uma elite multi-étnica. Tendo sido um espectador privilegiado desse período, quer comentar?

Com o Veiga Simão certamente. Mas havia uma barreira cultural muito grande, porque para as pessoas chegarem à Universidade têm de chegar a outros níveis de ensino. À universidade, estudantes africanos, só estavam a entrar significativamente em Agronomia, Veterinária e alguns para Medicina. De outras etnias, nas Engenharias, só tive colegas Indianos; e alunos de Engenharia Química só um Africano. Porque a educação só então chegava aos outros graus de ensino. Se nós tínhamos aqui um grande atraso escolar em Portugal, imagine-se em Moçambique.

De Moçambique viaja para Londres afim de se doutorar no Imperial College. Estamos na época do Maio de 1968 e de certo foi confrontado com outras visões do mundo. Em que medida esse período londrino marcou a sua vida futura?

Marcou fortissimamente. Eu sou das gerações que cresceram com o Estado Novo. O primeiro embate foi com o Humberto Delgado; quando ele aparece, eu estava no 7.º ano do Colégio Militar, uma instituição supostamente não contestatária, mas o entusiasmo pela

candidatura presidencial do Humberto Delgado no meu 7.º ano era enormíssimo, até por ele ser ex-aluno do Colégio. E eu entrei para o Técnico nesse ano. Estavam a rebentar algumas barreiras mentais. Pertencço à geração estudantil de 62. Eu era dirigente associativo em 62 e andei na rua. Lembro-me de estar no Estádio Universitário; estava equipado porque no dia do estudante havia umas provas desportivas de atletismo. Nessa altura eu era campeão de salto em altura. A polícia de choque estava à espera cá fora, mas não ousava ainda entrar no Estádio Universitário, e as pessoas estavam sentadas no chão. Até que eles começaram a avançar. Houve alguns colegas que me passaram as bandeiras e os cartazes que tinham na mão e eu, que estava equipado para o atletismo, lá fui numa corrida para ir esconder aquilo em lugar seguro, quando a polícia avançou. O dia do Estudante foi cancelado. Não houve provas desportivas. As únicas corridas que houve foram os estudantes a fugir à polícia. Todos os acontecimentos foram muito vividos por nós; 62 foi a primeira movimentação estudantil forte, e envolvia toda a gente. Muitos filhos de famílias conhecidas também foram presos e depois soltos. As pessoas estavam todas solidárias, porque o comportamento da polícia de choque era tão absurdo que produziu uma solidariedade muito forte. E depois havia alguns professores, mais ligados à União Nacional² e à Legião Portuguesa³ que, no Técnico, contavam historietas, obviamente imaginadas, para explicar o sucedido. E isso ainda nos irritava mais. Perderam a toda a linha. Houve um incidente curioso que talvez já defina a minha maneira de ser. Entendiam muitos que a greve era para ser a 100%. Mas havia algumas pessoas que queriam furar a greve, ou porque estavam noutra planeta, ou porque eram convictamente muito pró-regime. Houve uma assembleia geral do Técnico, que se realizou na piscina. A piscina estava vazia e as pessoas estavam dentro e fora da piscina, mas quem queria falar punha-se à borda da piscina, e eu a certa altura tomei a palavra para dizer que uma greve a 90% é uma greve muito mais forte que uma greve a

100%. Mas fui um bocado apupado. Porque as pessoas queriam uma greve a 100%, e queriam “linchar” as pessoas que furavam a greve. Na minha opinião, meia dúzia de pessoas a furar a greve dá muito mais força a uma greve, porque mostra que não há coacção, mas o clima emocional não ia por aí.

Apesar disto eu não estava nada politizado. Pertenci à grande maioria dos estudantes que em 62 não teve uma leitura política muito elaborada dos acontecimentos. Mas um bom número de dirigentes associativos como o Jorge Sampaio⁴ e o Vitor Wengrovius⁵, que estavam mais politizados e informados, interpretaram com mais profundidade o que se passou.

Mas estava na JUC, não era...

Na JUC, a leitura era emocional, de solidariedade, de uns episódios estranhos, coisas desagradáveis que se estavam a passar. E portanto a Guerra Colonial não me tocava, achava que havia legitimidade; e que à democracia, com o tempo a gente lá chegaria. Eu não estava de facto, como a maior parte das pessoas em 62, a fazer uma leitura política mais profunda, como um núcleo mais restrito podia fazer. Foi em Inglaterra que despertei para me politizar e de maneiras perfeitamente inesperadas. Lembro-me de estar no “Speakers Corner” a ouvir as pessoas dizer aquilo que lhes apetecia, e alguns até com mau gosto. Tudo podia ser dito e tudo podia ser ouvido, isso já me deixou um bocadinho atónito. Depois assistia aos debates na televisão, com a obrigatoriedade de haver sempre o contraditório. O debate era totalmente livre, mas com grande qualidade e respeito, o que também me deixava surpreendido. Em Portugal vivia-se num País em que as coisas eram muito condicionadas, e as pessoas podiam ter muito boas ideias, mas exprimi-las livremente em público era complicado, e todos tínhamos de praticar essa auto-contenção. Doe-me particularmente um programa na BBC, um canal que tinha sempre muita qualidade. O programa chamava-se, “Portugal, Dream of Empire”, em dois episódios, creio. O “Portugal, Dream of Empire”, era a guerra das Colónias, mas para servir de

fundo ao problema das Colónias, era o Portugalzinho que era dado da maneira bastante triste, com as velhinhas a andar em cima dos burros e com os lenços à cabeça.

Que era a realidade.

Que era uma realidade ou parte dela, que eu vivendo em Lisboa via pouco, mas era dada como uma parte principal. Portanto o programa retratava um Portugal ridículo a querer ser o dono de um Império. Por outro lado perguntou-me por 68. E é muito curioso que em 68, em Inglaterra, não aconteceu nada. E as pessoas em Inglaterra olhavam e não percebiam o que se estava a passar com os estudantes em vários países europeus, sobretudo em França. Nos Estados Unidos e na América Latina os contornos eram diferentes. Houve nessa altura alguns professores Americanos, de origem europeia, que voltaram à Europa, por causa, da oposição à guerra no do Vietnam. Era pois mais pela via dos Estados Unidos e da contestação à presença americana no Vietnam que os movimentos estudantis eram discutidos em Inglaterra. No que diz respeito aos acontecimentos em Paris, e noutras Universidades Europeias, havia incompreensão do significado do que estava a acontecer – excepto obviamente no caso de Praga.

Digamos que a sua formação democrática foi consolidada em Inglaterra?

Claramente em Inglaterra. Fui aliás muito influenciado pelos valores e pela cultura inglesas. Eu não teria tido a percepção e a leitura do problema colonial que fiz na minha segunda estadia em Lourenço Marques, sem a passagem por Inglaterra.

Em 1975 encontramos-lo já como Professor Agregado na UNL. Cremos que o Prof. Sousa Lobo esteve ligado a uma das primeiras Comissões Instaladoras da FCT. A curta vida da UNL é longa em eventos e em certos aspectos dolorosa. Não é este o local para fazer essa história, mas em seu entender o que falhou?

Eu acho que não falhou nada, está tudo a andar razoavelmente bem. Isto é, nós

podemos sempre sonhar que uma primeira trajectória inicial, “teria sido óptima se...”. Mas eu também posso imaginar que essa tal trajectória inicial, que alguns podem considerar o paraíso perdido, também iria ter uma crise de crescimento com problemas muito semelhantes àqueles que viámos a ter. Houve a revolução em 1974 e a demissão do 1.º Reitor no Verão de 1975 e a Universidade entrou em crise. Mas uma instituição é feita dos acontecimentos que a história traz. Tivemos a capacidade de ir ultrapassando esses acontecimentos e sobreviver com um projecto interessante e condigno, é o que interessa. Portanto eu meço muito mais o sucesso continuado da Universidade Nova de Lisboa pela capacidade de, em cada três ou quatro anos, passar sempre para um patamar de excelência e de realização melhor que o anterior. É verdade que nós sofremos um PREC⁶ muito mais forte que outros, mas não nos afundámos, e o projecto está cá e é interessante.

É um optimista?

Não sou um optimista, sou pragmático. Eu funciono muito com base no real. E o real são as pessoas reais, os tempos reais, o País real. O País em 1973 não tinha mestradados, não tinha doutores suficientes, não tinha estruturas de investigação, não tinha ainda muitas coisas. E estávamos a iniciar uma Universidade em competição com outras duas Universidades de Lisboa, centrando-nos só na pós-graduação, o que, naturalmente, gerava invejas ou mal estar. Com um apoio político hesitante, tenho dificuldade em imaginar que aquele projecto inicial fosse ter sucesso garantido. Pelo contrário, agora penso que era fatal que iria haver bastantes problemas. Um núcleo inicial de pessoas que estavam já na Universidade ia ser responsável pelo arranque. Algumas delas, deram problemas nessa fase inicial, como deram problemas mais tarde, e tê-los-iam dado na mesma. As instituições fazem-se com pessoas e às vezes demora um certo tempo até a instituição encontrar as pessoas certas para os sítios certos e as funções certas. Assim como nós temos de errar para aprender, as insti-

tuições também têm de errar para aprender. Mas temos que reconhecer que foi um arranque difícil.

No período de 1976 a 1979 foi conselheiro científico da UNESCO em Paris e de 1982 a 1983 coordenador do programa Ciência para a Estabilidade da INVOTAN. Ter aceite estes cargos teve algo a ver com o facto de não haver na UNL condições para trabalhar na Ciência e na Investigação?

Não. Eu tinha conhecido a Engenheira Maria de Lourdes Pintasilgo quando estudante. No princípio de 75, tive de parar por três ou quatro meses antes de entrar para a Universidade Nova; havia uma lei que dizia que as pessoas que vinham do Ultramar tinham de ficar no quadro geral de adidos e só podiam passar para um lugar em Portugal, dois ou três meses antes da data que estava prevista para a independência. Além disso nesse verão, o Reitor Fraústo da Silva pediu a demissão, como já disse. O projecto inicial da Universidade ficou mais ou menos congelado. O Reitor passou a ser o Professor Manuel Laranjeira. Quando a Engenheira Maria de Lourdes Pintasilgo me convidou para ser conselheiro científico na delegação portuguesa junto da UNESCO achei que era uma maneira interessante de ir investir o meu tempo. Mas não foi por escolha, foi porque de facto na Universidade Nova, se faziam uma série de plenários e se faziam tentativas de projectos no papel, mas depois nada ia para a frente. Havia instabilidade no Ministério da Educação. Estávamos realmente numa altura muito má em termos de projecto institucional. Ir para a UNESCO foi portanto uma oportunidade excepcional.

Nas eleições presidenciais de 1985 fez uma declaração na televisão, de apoio à figura da Engenheira Maria de Lourdes Pintasilgo.

Na primeira volta.

O que o levou a intervir na política de modo tão evidente?

Eu não fiz uma intervenção política, dei um testemunho sobre a maneira como a Eng^a Maria de Lourdes Pintasilgo tinha desempenhado as funções de embaixa-

dora de Portugal junto da UNESCO. Fiz um comentário muito explícito sobre o brilho e o sentido de responsabilidade que ela teve no desempenho dessas funções. Muita gente talvez não se tenha apercebido, mas Portugal foi expulso da UNESCO, antes do 25 de Abril. Aquilo foi um enxovalho muito grande, porque em geral os Países não são expulsos das organizações da ONU. E a reentrada não ia ser fácil. A Engenheira Maria de Lourdes Pintasilgo já tinha algum traquejo de relações internacionais, mas o seu perfil, cultural, e o brilho com que fazia as suas intervenções, fez dela uma figura central na UNESCO. Julgo que lhe dei um bom apoio, em muitos aspectos, não só no plano científico, mas também na organização da nossa delegação. A UNESCO cobre muitas áreas, problemas muito variados, e era preciso fazer a ligação com o país real nessas áreas todas. Realmente eu acompanhei sobretudo as áreas da ciência e ensino superior. A Embaixadora na parte política, fez as suas funções com grande talento e com um nível cultural tão elevado, que em muitas intervenções o registo político ficava em plano secundário. Já agora, a Engenheira Maria de Lourdes Pintasilgo também é Engenheira Química pelo IST.

O Prof. Sousa Lobo foi o primeiro presidente do actual Departamento de Química da FCT-UNL, tendo-se mantido no cargo por cerca de 6 anos. Será que já se pode fazer um balanço dessa tarefa?

Como noutras coisas que tenho feito, eu acho que o balanço vê-se sobretudo, não pelo que se passou nos seis anos, mas pelo que se pode avaliar dez anos depois. E eu tenho procurado, e particularmente como Reitor no segundo mandato, empenhar-me mais nas coisas que marcam a médio e longo prazo, na estratégia. E cada vez trato de maneira mais abreviada, e talvez com menos prioridade as pequenas coisas do dia a dia, do curto prazo. Acho que nesses seis anos procurei fazer mais do que gerir o Departamento. Lembro-me que quando o Professor António Xavier me pediu para liderar o arranque do Departamento de Química com esta configuração, eu fiz um compasso de espe-

ra, para que estabelecessemos as regras, o regulamento interno. Isso levou uns três ou quatro meses, e ele estava um bocado impaciente. Eu não sou de atrasar as coisas, mas achei extremamente importante que as regras do jogo, ficassem bem definidas, porque depois de começarmos seria mais difícil. O Departamento só começou a funcionar formalmente lá para Dezembro ou Janeiro, mas a comissão coordenadora, com a sua configuração e o seu papel, a natureza das Secções, e mais algumas regras que estão no nosso regulamento interno, foram os elementos de base. O regulamento é aliás muito curto, mas pedi desculpa às pessoas por o regulamento mesmo assim ter mais artigos do que a Constituição dos Estados Unidos... Por outro lado, havia a questão de descobrir o dinheiro para fazer o edifício departamental que encontrei no programa OID da península de Setúbal. Não tenho nenhuma responsabilidade quanto à estética externa do edifício, com o objecto em si que não teve concurso. A direcção da Faculdade contratou directamente uma equipa que lhe fora indicada anteriormente pela DGES, creio. Mas quando apresentaram o estudo prévio, lembro-me que disse ao arquitecto: “— olhe, o projecto que o senhor me apresentou, tem que ir para o caixote do lixo. Não é a parte externa porque isso é com a Direcção, mas a organização interna não serve”. Ele apresentou uma coisa que não ia funcionar bem. A sugestão para a maneira como o Departamento ficou organizado foi minha, melhorada depois pela equipa de arquitectos.

O número de candidatas a cursos de Engenharia tem vindo a diminuir. Na sua entrevista ao Boletim o Prof. Júlio Pedrosa sugeria que “engenharia pode ser uma formação de 2.º ciclo, em cima da formação de base de outra natureza, p.e. Química.” Concorda?

Não. No caso da Engenharia Química, esse modelo é o modelo alemão. Assim como nos Estados Unidos o Direito e a Medicina não são cursos de raiz mas pós-graduações (as pessoas tiram o primeiro grau generalista e depois é que entram para a *School of Law* ou *School*

of Medicine) também na Alemanha, com algumas excepções mais recentes, a Engenharia Química é uma pós-graduação para Químicos. Mas isso é uma excepção. O figurino dominante no mundo é o modelo anglo-saxónico, onde a EQ é um curso de engenharia, em que um Engenheiro Químico tem tanta Química na sua formação como um Engenheiro Civil ou Mecânico; não é o caso em Portugal em que o Engenheiro Químico também tem uma boa base de Química, como se tivesse um “joint degree” em Química e EQ. É esse o nosso modelo, é bom e não é para deitar fora.

Em relação às Grandes Écoles, em França, é diferente; fazem um primeiro ciclo de triagem muito geral, mas não penso que esse esquema seja bom, pois selecciona 1 aluno em cada 6/7 candidatos. Os candidatos fazem um ciclo preparatório em 2 ou 3 anos e só alguns entram numa Grande École onde fazem os 3 anos finais. Eu se tivesse que aceitar uma mudança drástica, neste momento, escolheria como opção o novo modelo italiano. Trata-se de um esquema interessante, mas é arriscado mudar toda a estrutura universitária. Não creio que seja desejável essa reforma. Devem fazer-se de preferência reformas mais suaves e evolutivas.

Pensa então que este poderia ser um modelo para a EQ?

Não, penso que uma opção evolutiva é melhor. As Engenharias deveriam passar a ter a estrutura 4+1, o que fica muito próximo do que se está a fazer na Escócia ou nos USA. A Escócia, como tem 4 anos e mais 1 para o mestrado está sempre a ser confrontada com a Inglaterra que tem 3 e mais 1 de Mestrado. Como os alunos podem optar por um curso mais curto na Inglaterra, a Escócia já está a oferecer um *fast-track* para alunos com boas médias poderem entrar imediatamente no 2.º ano. Há maneiras de encurtar a formação para os alunos muito bons, a quem pode ser proporcionado um percurso um pouco diferente.

Nós, se formos para o 4+1, podemos fazer o seguinte: ao fim do terceiro ano

estão definidos os alunos que vão fazer um quarto ano terminal, com uma configuração diferente, e os alunos que vão para 4.º ano para depois seguirem para o 5.º ano, de Mestrado profissional. Esta é solução dos 4+1, mas com um 3+1, para 1/3 dos alunos por hipótese, com uma formação terminal já mais aplicada, para sair para o mercado de trabalho. Este modelo permite construir algo mais próximo daquilo que temos e simultaneamente vai de encontro à necessidade de mudança, mas sem fazer uma revolução. Fazendo uma reforma.

Numa entrevista recente ao Público, afirmou que “Há cursos a mais”. Poderia desenvolver um pouco este tópico? Há cursos a mais em que áreas? Quer isso dizer que também há Universidades a mais? O excesso na quantidade terá como consequência uma falta de qualidade?

Sim. Se nós olharmos para Países ou regiões mais desenvolvidos, como p.e., a Califórnia temos 70% dos jovens a participar no Ensino Superior, mas desses, 2/3 estão nos *community colleges* (cursos de 2 anos ou 2+2 anos). O habitual é que os restantes 2 anos sejam feitos no circuito universitário. As redes universitárias são duas também, a *University of California* e a *California State University*. A *University of California* é uma *doctoral university* e a *State University* só tem o nível de bacharelato e mestrado. Devemos reter essa ideia de que há instituições onde há investigação e se faz o doutoramento e outras *teaching oriented*, porque não têm a cultura da investigação. Se formos analisar na Califórnia, que é um dos estados mais ricos e desenvolvidos dos USA, a percentagem dos estudantes que estão a frequentar as *doctoral universities*, as *research oriented institutions*, é apenas de 8 a 10 %. Eu defendo que nós temos que especializar a nossa rede de Ensino Superior. Talvez não valorizasse tanto as denominações, mas deveríamos ter uma agência que certificasse a pós-graduação; os brasileiros têm isso há 30 ou 40 anos, o CAPES. Classificam inclusivamente os mestrados em níveis de 7 a 1, e só os mestrados de nível 6 e 7 é que podem conviver com programas de

doutoramento. Em Portugal já temos algumas universidades privadas a anunciar programas de doutoramento, quando nem sequer têm investigação reconhecida e avaliada. Esta desregulação não é conveniente. Prefiro pois um sistema liberal, mas regulamentado por uma Agência que faça um trabalho de avaliação e certificação. Não podemos de facto, basear-nos apenas em apreciações burocráticas.

Cursos a mais, existem porque o número de matrículas tem vindo a diminuir e o número de cursos a aumentar sempre. A Universidade tem autonomia através dos seus conselhos científicos e pedagógicos, mas não pode ter plena autonomia para criar novos encargos financeiros de vulto em áreas já saturadas por oferta excessiva de cursos. Eu não aceito que se o País só precisar de 3 ou 4 cursos de Arquitectura, se autorizem 25. Estamos a entrar em desregulação tanto quando se acompanha uma procura excessiva, por parte dos alunos, que o mercado não sustenta, como quando não há procura social e continuamos a oferecer novos cursos que ficam vazios. É o caso das Engenharias ligadas à Agricultura; existem no País umas 10 ou 12 licenciaturas com uma taxa de ocupação de 20%. Desses 12 cursos só há lugar para 2 ou 3. O contribuinte português tem que sustentar estruturas sobredimensionadas?

Pensa que a Universidade poderá aproveitar os acordos de Bolonha para antes de mais debater o que é a educação superior?

Concordo totalmente. É uma ocasião excepcional para isso; por exemplo, em relação ao sistema europeu de créditos ECTS, nestes últimos meses houve uma evolução importante no que diz respeito à sua aplicação. Como é que o sistema de ECTS, com 30 créditos europeus por semestre, lida com as cadeiras em atraso? Poder-se-á resolver esse problema permitindo ao aluno fazer muito mais do que os 30 ECTS por semestre? Nos USA e na Inglaterra, sobretudo nos USA os alunos em muitas universidades têm uma apreciável liberdade de opção em relação ao perfil do curso e das opções que vão buscar. O limite máximo de cré-

ditos sobe então, como norma, para 34 ou 35 por semestre, para permitir que o estudante possa escolher alguma cadeira de opção. E se o estudante for um aluno excepcional, que fez o 1.º ano com notas excelentes, ele poderá ter a possibilidade de se inscrever até aos 45 créditos. Como já mostrou que é um aluno muito bom, pode desejar fazer um curso em menos 1 ano e passar ao mestrado mais cedo. Contudo, se o aluno chumbou em várias cadeiras, ficará *on probation* e inscreve-se só a 22 créditos! Infelizmente nós temos o conceito ao contrário. Há mesmo escolas que fixam 60 ECTS por ano, mas, alargando esse limite para os alunos com cadeiras em atraso até aos 84 ECTS. O aumento da carga do número de créditos é maior para os alunos que comprovadamente, não tiveram capacidade para cumprir a escolaridade normal. Por outro lado, no que diz respeito à carga docente, o desafio coloca-se também a um outro nível. No fundo teremos dois ou três tipos de cadeiras, a cadeira dos 6 créditos, mediana, a cadeira dos 3, uma cadeira mais simplificada, mais informativa, e a cadeira dos 8 ou 9, que é uma cadeira mais pesada, de que haverá poucas. Em geral as cadeiras têm 6 créditos, o que quer dizer que 5 cadeiras semelhantes em termos de trabalho pessoal, fazem a carga de 1 semestre. E qual é a escolaridade de cada cadeira? É a que for. Actualmente, se um professor está a dar uma cadeira com 3 aulas teóricas e 4 TP, p.e., tem os 6 créditos. Esta nova escolaridade permite que outro formato qualquer, que se demonstre que é melhor, mais interactivo, por exemplo pondo os alunos a fazer trabalhos de casa, apresentados através da internet, e haver só 2 teóricas e uma aula TP de quinze em quinze dias. Todas as mudanças podem ser feitas, porque o que interessa é o trabalho individual dos alunos, desde que essas mudanças comprovadamente se traduzam num melhor trabalho e rendimento por parte dos estudantes. Ou seja, esbate-se o jogo das horas por semana e a nossa atenção vai-se debruçar sobre o resultado da aprendizagem.

Para certas licenciaturas julga conveniente manter o 4+1 anos, no entanto

muitas passarão para a fórmula dos 3 anos. Como irá o nosso país aplicar os Acordos de Bolonha sem melhorar a exigência e qualidade no ensino pré-universitário?

Penso que é desejável ter cursos curtos. Temos de nos habituar à ideia de que precisamos imenso de diplomas superiores curtos, os CET (Curso de especialização técnica) um *sub-degree*. De facto um ano, ano e meio, não é um grau académico e é dado em instituições vocacionadas para isso. O primeiro grau formal terá uma denominação comum, mas o facto de ter 3 ou 4 anos, em instituições diversas, é normal. Por exemplo, nos USA há muitos bacharelados de 3 anos, só que todas as Doctoral Universities têm 4. É evidente que um grau com um certo nível científico tem de ter 4 anos. Noutra Universidade terá 3, e o mercado de trabalho saberá o que cada coisa significa. Para além disso, p.e., imagine aqui um curso de Química com 4 anos que segue para o mestrado, e tem outra escola que também oferece um curso de Química mas em 3 anos; é evidente que os alunos do curso de 4 anos têm condições de sucesso e aceitação para um mestrado em Química muito superiores, mas os outros alunos também são candidatos; podem entrar ou não, mas têm a possibilidade de se candidatar. As pessoas com o 1.º ciclo são potenciais candidatos ao 2.º ciclo. A selecção depois se fará.

Tem sido um defensor constante da importância do Campus Universitário...

Exactamente!

um Campus que não se esgota nas horas de aulas, mas que estimula e propicia outras experiências e aventuras intelectuais....

e também desportivas e culturais.

Sim. Será melhor falarmos de aventuras culturais.

Exactamente!

Quais os modelos em que se inspira? Qual a importância do Campus?

Por tudo o que tenho visto penso que o Campus ao estilo americano é o que mais nos interessa. Na Europa há



Vista de Lisboa a partir da ala Norte do Campus do Monte da Caparica da UNL.

menos exemplos. Embora certas Universidades medievais fossem um *Campus* do tipo americano, acabaram por ficar no centro de cidades, com muito trânsito, etc. Ou seja na Europa esse tipo de Universidade, de vila universitária, quase desapareceu. O que se construiu de recente é um conjunto de hectares com edifícios públicos que funcionam durante o dia e fecham à noite. As residências de estudantes são uma espécie de armazéns para alojar pessoas à noite. O projecto não está construído para ser socialmente agradável e integrador, para fazer concorrência a outros pólos de interesse da vida social nocturna, diurna e de fins-de-semana. O *Campus* americano tem de facto essas características, que faltam ao modelo europeu. Berkeley é um bom exemplo, porque é uma universidade pública e é a mais cotada universidade pública americana. Estando nós em São Francisco atravessamos uma ponte, que não se chama 25 de Abril mas Oakland bridge, e que por um lado vai para uma cidade chamada Oakland, que é a Almada lá do sítio, e por outro leva-nos a Berkeley. E Berkeley começou por ser apenas um Campus com alguns hectares mas cresceu para ser uma vila académica. Na maioria dos campus académicos americanos, que são muitos, há a

preocupação de ter as diversas tipologias residenciais, de dotar a vida académica das várias actividades e serviços para que haja uma vida agradável. O *Campus* do Monte da Caparica tem uma posição muito interessante porque estando a 11 km do coração de Lisboa, quando se está no *Campus* uma pessoa está fora de portas e num espaço próprio. Há poucos sítios, a 11 km de Lisboa, onde exista este potencial de criar um espaço próprio agradável, com essas valências todas que referi, e com uma boa acessibilidade a Lisboa.

E porque é que não se conseguiu construir um Campus bonito no Monte de Caparica, onde espaço e terreno fértil abundam?

Houve grandes progressos nos últimos anos, mas ainda não se conseguiu.

E porquê?

Estamos um bocado atrasados. Mas continuamos a trabalhar para isso. Para mim é inevitável que lá vamos chegar. A chegada do metro de superfície em 2005 vai ajudar a mudar muita coisa.

Em 1992 aceita ser Vice-Reitor da UNL e em 1995 é eleito Reitor, tendo cumprido dois mandatos. Será oportuno pedir-lhe que nos indique aquilo que

correu bem e aquilo que correu mal nos seus dois mandatos. Por outras palavras, quando aceitou candidatar-se a Reitor tinha concerteza, sonhos, projectos para a UNL. Conseguiu os seus objectivos?

Em primeiro lugar é preciso conseguir que a Universidade sinta e se veja como uma Universidade, e não como uma federação de Faculdades e Institutos. Embora eu ache que se tenham feito grandes progressos, enquanto fui Reitor, ainda há caminho para andar. Claro que se olharmos para as nossas Universidades mais vizinhas, em particular a Universidade Técnica, vemos que sofre do mesmo problema, até num grau mais acentuado que o nosso, na medida em que as escolas da Universidade Técnica pré-existiram à própria Universidade. Foram integradas numa Universidade única em 1931, quando elas já todas existiam. E toda essa consciência de ser Universidade é bastante importante para que as pessoas percebam que os órgãos de cúpula têm uma função, exijam essa função e esperem deles essa função. O facto de ter posto a Faculdade de Direito em Campolide, fez com que aí haja um Campus Universitário com três instituições, para além da Reitoria, do Serviço de Acção Social e das



Explicando o projecto para a ala Norte do Campus do Monte da Caparica da UNL

residências, etc. É desejável que o mesmo aconteça no Campus da Caparica, se puderem vir para aqui a Escola Nacional de Saúde Pública e a Faculdade de Ciências Sociais e Humanas, por exemplo. Julgo que há boas condições para ambas virem com vantagens inegáveis. E se neste Campus estiverem três instituições, tudo isto se transforma. A Universidade ficará como uma instituição com dois campus, em que há um *campus* menor que está dentro de Lisboa, com uma certa centralidade, com proximidade aos órgãos decisórios da administração e do Governo. É semelhante ao caso de Utrech. Não vale a pena incluir neste enquadramento Medicina e Escolas associadas, porque essas estarão sempre espalhadas pela cidade, com ramificações nos hospitais. Repare que a Universidade Autónoma de Barcelona, com um *Campus* quase completo fora de portas, tem a Medicina na cidade.

Que objectivos mais importantes conseguiu como Reitor?

Outros o dirão melhor que eu, mas a lista é longa, não temos tempo nem espaço, e dou-lhe apenas uma *short-list*: Reforma do Instituto de Higiene e Medicina Tropical, criação da já prestigiada Faculdade de Direito, integração e con-

solidação do Instituto de Tecnologia Química e Biológica, 2 residências de estudantes de qualidade segundo um conceito novo, nova reitoria e bom enquadramento urbanístico no *Campus* de Campolide, consolidação orçamental do Instituto Superior de Estatística e Gestão de Informação, reformas na Faculdade de Ciências Sociais e Humanas com a introdução do esquema maior / / minor, plano de expansão para a Faculdade de Ciências Médicas com muita qualidade, melhoria substancial do funcionamento da Reitoria, saldo excepcional em diversas batalhas jurídicas sobretudo com a Câmara Municipal de Lisboa, reforma urbanística total e novos edifícios no Campus da Caparica, revisão com sucesso dos Estatutos da UNL. Chega?

A sua carreira oscilou entre o investigador científico, o professor e o gestor universitário. Concerteza que o investigador pagou um preço ao gestor. Valeu a pena?

A investigação científica dá-me uma gratificação intelectual enorme. E eu fiz investigação científica durante muito pouco tempo, quinze anos ou coisa parecida. Porque exige muita dedicação, a pessoa tem de estar a ler bastante, tem de estar actualizada e tem de estar a re-

lacionar-se com as ideias que estão no terreno, para estar a fazer coisas relevantes, pertinentes, e que correspondam a problemas que estão levantados e à espera de solução ou melhor solução. Em termos de actividade do espírito é muito mais gratificante, na medida em que, os problemas de natureza pessoal ficam mais esbatidos. No meu caso, ter ficado envolvido na gestão aconteceu naturalmente. Nunca me candidatei a nenhum lugar por minha iniciativa. Foi sempre porque alguém me veio desinquietar. Mas se olhar para trás, verifico que aos quinze anos já andava metido em coisas parecidas, no sentido de estar à frente de associações, tomar iniciativas organizacionais, porque também vieram ter comigo. Traz-me alguma realização pessoal, a actividade de gestão, quando é possível reformar, transformar a realidade. Não tenho nenhuma paciência para gerir o poder pelo poder. Na minha passagem pela UNESCO (foram quatro anos) os dois primeiros foram muito estimulantes, mas os dois últimos já tiveram pouca graça. Na primeira parte, enquanto estava a aprender e a realizar, a organizar a missão e estabelecer os contactos, foi interessante. Mas depois, a partir do momento em que já tinha dado a minha contribuição, já conhecia os

cantos à casa, mas estava numa instituição, muito longe do terreno, a discutir os problemas da Ásia, ou da África ou da América Latina, a milhares de quilómetros de distância, aquilo estava a tornar-se um aborrecimento para mim. Enquanto estiver em lugares com possibilidade de transformar a realidade, estou motivado. Se for só para estar a gerir uma instituição, contente e estável, sem perspectivar mudanças, acho que não tenho perfil para isso.

Surpreendentemente pediu a reforma, quando se esperava o seu contributo directo por mais uns anos. O que o motivou a tomar uma decisão tão radical?

A minha disponibilidade para com a Universidade é a mesma. E podendo pedir a reforma, a Universidade deixa de ter um encargo para comigo. É um benefício para a Universidade porque tem o meu trabalho sem ter de me pagar. Em segundo lugar, porque deixo de ser candidato a cargos. Em terceiro lugar porque esta minha disponibilidade, agora é gerida de uma maneira que me é favorável. Estou interessado em fazer uma série de coisas, estou disponível, mas posso escolher.

Como se esperava, não vai ficar parado. Sabemos que aceitou um convite para ser Director do Madan Parque⁷ e que vai ter a seu cargo a gestão do or-

denamento do Campus do Monte de Caparica. Que novas ideias nos traz?

Ah! são muitas. Tenho uma lista aí de umas quarenta, que já levei ao Reitor, e se dessas quarenta questões, metade, daqui a dois ou três anos, estiverem feitas ou a caminho, será um grande sucesso. Se for só um quarto, naturalmente também será já muito bom. Algumas coisas podem parecer menores, mas eu dou-lhes uma certa importância, por exemplo, pistas para bicicletas nos arredores. Outras têm a ver com encontrar parceiros para fazer certo tipo de investimentos, como residências e outras estruturas importantes. Como o Centro Académico, uma espécie de mini-centro comercial, e incluindo a associação dos estudantes, e as actividades culturais. Vai agora construir-se a biblioteca, adjacente à futura Praça da Universidade, que deverá ser um centro da vida académica e da vida social do Campus dentro e fora de horas, incluindo os fins de semana. O metro a sul do Tejo também vai ter uma estação próxima dessa Praça. A parte residencial deverá ter diversas componentes para os vários segmentos do mercado académico incluindo os estudantes casados ou em princípio de vida, que estão a fazer tese. Para eles, o facto de poupar duas a três horas por dia, nos transportes é importante. E também existe o projecto resi-

dencial para professores reformados, que vem já do Prof. Loyd Braga.

E de muito mais se falou do Campus, das árvores plantadas, das coisas feitas que não se vê de imediato, mas que lá estão, das estratégias para o desenvolvimento futuro, e concluindo com uma visita guiada, a que um um pouco fresco vindo do rio temperava o calor de um sol inclemente de uma tarde de verão.

Referências

- 1 Juventude Universitária Católica.
- 2 União Nacional, era na altura o partido único do regime.
- 3 Força para-militar de suporte ao regime ditatorial de então.
- 4 Actual Presidente da República.
- 5 Victor Wengrovius, foi dirigente da JUC, e uma figura conhecida da oposição ao regime de Salazar. Foi um dos fundadores do MES, Movimento de Esquerda Socialista criado em Maio de 1974, entretanto extinto.
- 6 PREC – processo revolucionário em curso. Designação usada para definir o período pós-revolução do 25 de Abril.
- 7 Parque de Ciência e Tecnologia, que inclui a função de incubação de empresas, a funcionar junto ao Campus da Caparica.

Luís Sousa Lobo

Do boletim da SPQ pedem-me um perfil do Luís Sousa Lobo. Concedem-me quinze dias. Não hesito, mesmo sabendo que sairá obra incompleta e que outros poderiam, com conhecimento de causa, defini-lo a rigor. Limitar-me-ei aos traços que melhor conheço. Será, então, um esboço de perfil o que escreverei. Acrescentarei um ou outro apontamento de percurso. E a mais não poderia aspirar uma prosa de duas páginas, quando a matéria pretende abranger algumas décadas de inter-

venção do sujeito. Da sua vida pró-activa, como agora se diz. Como homem, como cidadão, como professor e investigador, como reitor, como académico e engenheiro. Omitirei do perfil o Amigo, que a amizade é coisa mais para se viver e reconhecer do que para se descrever.

Cruzei-me com o Luís Sousa Lobo nos corredores do Técnico, nos anos sessenta, enquanto estudantes de engenharia química. Desse tempo só recordo que nunca chegámos à fala: ele andava mais adiantado no curso e a minha actividade estudantil não ultrapassava os (apertadíssimos) limi-

tes da redacção do jornal da AEIST. O nosso primeiro contacto, ainda que em forma epistolar, deu-se no início da década de 70 quando ambos éramos assistentes da Universidade de Lourenço Marques: eu, recém-chegado a Moçambique, e o Luís preparando já o seu regresso ao Departamento, enquanto concluía o doutoramento no Imperial College (que concretizou em 1971). Enviávamos de Londres extensas e detalhadas listas das peças, equipamentos e reagentes que haveríamos de encomendar para que ele pudesse montar o seu laboratório e continuar a inves-

tigação em África, logo que chegasse. Como veio a acontecer. Em menos de um ano tinha as linhas de vácuo e as microbalanças a funcionar e um primeiro aluno para doutoramento – o Carlos Bernardo – a iniciar-se na investigação da cinética da deposição de carbono em superfícies metálicas (de níquel, se bem recordo). Foi para nós todos, assistentes em princípio de carreira, uma demonstração de que, afinal, a iniciativa pessoal, o entusiasmo, o saber e sentido de organização podiam construir uma Universidade em que se produzia conhecimento científico apesar dos muitos milhares de quilómetros que nos separavam dos avançados laboratórios ingleses e americanos. Para tudo isto foi essencial, e é justíssimo que se refira, a planificação de recursos orientada de forma inexcedível pelo nosso esclarecido e afável director, o Professor J. J. Barbosa Romero, a quem, aliás, o Luís Sousa Lobo sucedeu no cargo, em 1972/73 (e eu próprio, depois, circunstancialmente, em 1975). A perspectiva e a concretização da independência de Moçambique vieram introduzir uma perturbação no sistema, induzindo a dispersão do corpo docente do DEQ/ULM pelas diversas universidades portuguesas, depois de maiores ou menores tempos de residência em Lourenço Marques, Braga e Guimarães, Porto, Aveiro, Coimbra e as universidades de Lisboa foram destino de quase todos. O Luís Sousa Lobo fixou-se na Universidade Nova, onde deixa marca da sua acção. Agregado (pela Universidade de Coimbra), professor catedrático e presidente do Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia, vice-reitor e reitor da Universidade. Um quarto de século de empenhado envolvimento na vida da Escola a que se dedicou, com notável sucesso. Quem, como nós, tenha visitado (ou, simplesmente, visto) ao longo dos anos as instalações da Universidade Nova no Monte da Caparica, em Campolide ou em Oeiras pode testemunhar transformações clara-

mente visíveis. São, em grande e significativa parte, obra sua, dos que o acompanharam e dos que o escolheram e apoiaram (sem esquecer, naturalmente, o que é devido àqueles que o antecederam). Menos visível, para um observador exterior, mas não menos determinante para o inegável sucesso da Universidade Nova terá sido a sua influente intervenção na definição dos cursos da sua especialidade (e de outras), no lançamento e na consolidação das Faculdades e Institutos mais recentes, na fixação do modelo orgânico e estatutário da universidade. Tudo isto sem deixar de acompanhar, de incentivar e de se interessar pelo desenvolvimento da investigação científica da sua especialidade, continuando a orientar e a participar em trabalhos de catálise e cinética química, apesar da curta disponibilidade consentida pelos muitos *must* das obrigações institucionais. E de se envolver nos aspectos pedagógicos mais marcantes dos cursos e da sua Escola, visando, sempre, de forma muito esclarecida e informada a melhoria do Ensino Superior em Portugal. Chegou a ser, no início dos anos 80, conselheiro científico da nossa Missão na UNESCO, em Paris, foi o primeiro presidente da respectiva Comissão Nacional (em 1980) e membro do Conselho Nacional do Ensino Superior. Apesar da absorvente actividade requerida pelas tarefas no âmbito da política universitária conseguiu conjugar, com notável equilíbrio, essas solicitações com os interesses pessoais do professor e do investigador.

Um traço mais neste *perfil*. As versões que conheço do seu currículo, sempre muito sintéticas, começam invariavelmente com uma declaração que identifica o homem de família e os seus primeiros afectos: "casado, quatro filhos, dois netos." Só isto bastaria para uma vida cheia.

Nasceu na industriosa vila de Alhandra e iniciou-se profissionalmente como engenheiro de processo nas fábricas da CUF, no Barreiro (curiosa-

mente, a terra em que nasci, cresci e me formei). Só depois desta sua experiência na arte, onde deixou contributo escrito – um interessante artigo sobre a cinética de partículas sólidas em telas transportadas – decidiu enveredar pela carreira académica, que abraçou. Afigura-se-me de realçar, aqui, que enquanto professor e académico nunca deixou de pensar (e, portanto, de sentir) como engenheiro. Significativamente, a primeira notícia que tive da sua actividade orientadora na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova, a cuja comissão instaladora pertenceu de 1980 a 1982, relaciona-se com os primeiros cursos de pós-graduação, em Refinação de Petróleos e Petroquímica, que organizou em ligação com a Indústria (para cujos júris se lembrou de me convidar). Não sei de cor os cargos que exerceu na Ordem dos Engenheiros, mas recordo que, entre outros, foi seu Vice-Presidente, acumulando com a Vice-Presidência da FEANI – Federação Europeia de Engenheiros, para que foi eleito por unanimidade. Mais importante do que os cargos formais que entretanto desempenhou foi a sua acção como dirigente do organismo profissional: todos sabemos que a si se deve a quota principal de racionalização da orgânica actual da Ordem, consubstanciada na criação dos Colégios de especialidade, e a efectiva implantação do processo de acreditação profissional dos engenheiros, onde a OE foi (e continua a ser) pioneira e modelo em Portugal. Interveio, também, na génese da Academia de Engenharia. Nada lhe terá sido fácil, mas foi conseguido. E bem. Em tudo isto é possível destrinçar um "antes" e um "depois". E depois do "depois", estou certo, o Luís Sousa Lobo continuará a concretizar projectos pensados e sérios. Para todos nós.

Lélio Quaresma Lobo
Universidade de Coimbra
Julho 2003

Agora em Português!

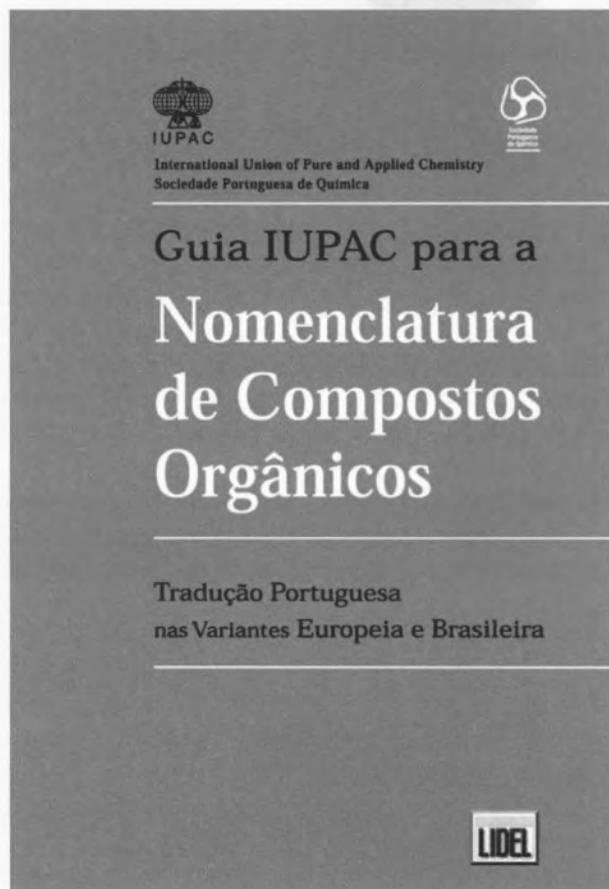
Um livro de referência para todos os Químicos!

Porque é necessário saber identificar uma espécie química por meio de uma palavra escrita ou pronunciada;

Para que o leitor, ou simplesmente o ouvinte, possa deduzir a estrutura a partir do nome, os nomes dos compostos devem ter tanta relação quanto possível com as suas estruturas;

E como tudo isto requer um sistema de princípios e de regras, cuja aplicação dá origem a uma nomenclatura sistemática,

Aparece, agora em PORTUGUÊS, o Guia IUPAC para a Nomenclatura de Compostos Orgânicos que actualiza o conjunto de regras contidas na última edição de *Nomenclature of Organic Chemistry* e permite ao utilizador criar nomes correctos, na nossa língua, adaptados a cada caso particular.



RESULTADO DE UM EXAUSTIVO
TRABALHO DE CONSULTA

REVISTO POR INÚMERCOS
ESPECIALISTAS NACIONAIS

Tradutores

- Ana Cristina Fernandes - Universidade Lusófona de Humanidades e Tecnologias de Lisboa
- Bernardo Herold - Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa
- Hernâni Maia - Universidade do Minho
- Amélia Pilar Rauter - Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa
- José Augusto Rosário Rodrigues - Universidade Estadual de Campinas do Estado de São Paulo

ADAPTADO À LÍNGUA PORTUGUESA

Inclui referência à variante brasileira sempre que esta seja diferente da europeia

LIDEL - Edições Técnicas, Lda
Www.lidel.pt • E-mail: promocao@lidel.pt
Lisboa: 213541448 • Porto: 225097993/5 • Coimbra: 239822486



Conversão de NO e N₂O usando misturas binárias de cobre suportadas em carvão activado

SÓNIA A. CARABINEIRO¹, JOAQUIM S. VITAL¹, ANA M. RAMOS¹, FRANCISCO B. FERNANDES², ISABEL F. FONSECA^{1*}

Resumo

Na sequência do trabalho iniciado pelo Prof. Doutor Sousa Lobo, a Doutora Isabel Fonseca prosseguiu a investigação na área da gaseificação catalítica de carvão tendo sob sua orientação, obtido o Mestrado em Química dos Processos Catalíticos e o doutoramento em Engenharia Química (1993).

Após ter concluído o doutoramento, realizou um *post doc.* em Pennsylvania State University (USA) no Departamento de Materiais e Engenharia, que lhe permitiu aprender técnicas de preparação e caracterização de carvão activado funcionalizado.

Os carvões activados possuem, na sua estrutura, átomos de oxigénio, azoto, hidrogénio, cloro, enxofre, etc., cuja origem pode estar associada ao precursor usado, ao método de activação ou podem ser introduzidos por pós-tratamento.

Os diversos tratamentos que se podem fazer ao carvão activado, permitem introduzir na superfície deste, grupos funcionais com oxigénio (ácidos carboxílicos, fenóis, quinonas, lactonas, etc.) ou com azoto (aminas, imidas, etc.). A quantidade e a natureza destes grupos funcionais depende das condições experimentais utilizadas.

Estes carvões funcionalizados, poderão ser usados como suportes de catalisadores, permitindo uma maior dispersão da fase activa ou simplesmente como catalisadores ou adsorventes.

Tendo em vista a aplicação destes materiais tão versáteis e baratos, o grupo de investigação composto pelo Doutor Joaquim Vital, Doutora Ana Maria Ramos e Doutora Isabel Fonseca, iniciou o estudo da utilização de carvões funcionalizados como catalisadores no estudo de reacções

em química fina e de polimerização de terpenos.

Recentemente, tem-se vindo a usar o carvão funcionalizado como suporte de catalisadores sob a forma de complexos imobilizados nos grupos funcionais, com o objectivo de evitar a sua lixiviação, em reacções de oxidação de terpenos em fase líquida.

A par destas áreas de investigação, estuda-se ainda a adsorção de compostos orgânicos e metais pesados de águas residuais, em carvões activados funcionalizados.

A utilização do carvão activado como suporte de catalisadores, permitiu fazer o estudo da conversão de NO, N₂O, CO₂ e SO₂ usando como catalisadores metais de transição e misturas binárias com metais alcalinos e alcalino-terrosos, de que é exemplo o trabalho apresentado.

Introdução

NO, e N₂O são gases poluentes, que causam enormes danos no meio ambiente, sendo hoje em dia a sua eliminação e conversão um assunto da maior prioridade [1].

Nos últimos anos a remoção de NO de gases de exaustão, tem-se tornado objecto de estudo de extrema importância,

tendo a redução catalítica de NO usando carvões como agentes redutores sido intensamente investigada [1-11].

A reacção C-NO depende significativamente da composição do catalisador e da natureza do carvão [8]. Os principais factores que influenciam a velocidade das reacções com o carvão são:

- a) concentração dos centros activos na superfície,
- b) cristalinidade e estrutura do carvão,
- c) difusão dos gases reagentes para os centros activos.

McKee estudou o efeito de metais alcalinos, alcalino-terrosos e de transição, como catalisadores da gaseificação do

¹ Departamento de Química, REQUIMTE/CQFB, ² Departamento de Ciência dos Materiais, CENIMAT, Universidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia, 2829 -516 Caparica, Portugal

carvão com O_2 , CO_2 , H_2O e H_2 [12, 13], concluindo que processo catalítico envolve um ciclo de oxidação-redução. O estado de oxidação do metal determina o seu comportamento, e a capacidade do precursor ser reduzido pelo carvão a um estado de oxidação mais baixo é um factor importante [12, 13]. Igualmente, a capacidade do catalisador "molhar" e espalhar-se na superfície do carvão promove um maior contacto catalisador/carvão, aumentando a reactividade. [1, 2, 12–18].

Segundo Illán-Gomez *et al.* os metais alcalinos, alcalino-terrosos e de transição aumentam a quimissorção de NO e têm um papel importante no ciclo redox, promovendo a transferência de oxigénio da superfície do catalisador para a superfície do carvão, produzindo CO_2 e CO [6–8]. Este mecanismo é análogo ao que ocorre noutras reacções de gaseificação com carvão [12, 13].

Segundo Suuberg *et al.*, a temperaturas baixas, a quimissorção dissociativa de NO dá origem à formação de complexos C(O) e a decomposição destes complexos a temperaturas mais elevadas, conduz à formação de CO_2 e CO [11]. Recentemente Illán-Gomez *et al.* verificaram analisando os produtos de reacção, que a conversão de NO ocorre em três etapas distintas, consoante a temperatura [5–8]:

- i) Para temperaturas inferiores a $300^\circ C$, N_2 e N_2O são os únicos produtos da reacção. Não se observam produtos que contenham oxigénio, com a excepção do N_2O . O oxigénio proveniente da redução de NO é retido na superfície do catalisador/carvão. Esta etapa parece envolver uma quimissorção dissociativa irreversível de NO, havendo retenção de oxigénio e dessorção de compostos contendo azoto.
- ii) Para temperaturas superiores a $300^\circ C$, a concentração de N_2 continua a aumentar e observa-se o aparecimento de CO_2 , ao mesmo tempo que a velocidade de redução de NO aumenta. Quanto mais activo é o sistema catalítico, mais baixa é a temperatura em que se inicia a for-

mação de CO_2 . Pode observar-se um excesso de CO_2 em comparação com a quantidade de N_2 , podendo este facto estar relacionado com a retenção de oxigénio observada na primeira etapa.

- iii) Para temperaturas superiores a $500^\circ C$, a formação de N_2 torna-se constante e observando-se também produção de CO. A razão CO/CO_2 aumenta com a temperatura. Os grupos oxigenados presentes na superfície de carvão decompõem-se com o aumento da temperatura, podendo haver um excesso de CO em relação à quantidade de NO reduzida. Verifica-se ainda ausência de N_2O , havendo a quimissorção de NO nesta gama de temperaturas, apenas se forma N_2 (em contraste com o que se observa na primeira etapa em que a quimissorção dissociativa do NO origina como produtos da reacção N_2 e N_2O). Os centros activos que retêm e transferem o oxigénio para o carvão são diferentes, dependendo da natureza das espécies químicas envolvidas em cada caso [5–8].

Existem alguns estudos publicados para a reacção do N_2O com carvão [1, 4, 18, 19–22], todavia o seu número é ainda muito reduzido quando comparado com os estudos efectuados com NO. Para a reacção não catalítica, vários autores observaram que a velocidade de decomposição de N_2O em carvão activado é superior à velocidade de decomposição de NO [1, 4, 18, 19, 22]. Rodriguez-Mirasol *et al.* [4, 19] verificaram que os produtos obtidos são N_2 e CO_2 (com uma estequiometria de 2:1). O N_2O parece promover a formação de complexos C(O) à superfície, mais ou menos estáveis, que se decompõem, originando CO_2 e centros livres [1, 4, 19–21].

Para a reacção catalítica, o mecanismo de decomposição do N_2O não é alterado pela presença de catalisador. O papel do catalisador parece ser diminuir a temperatura de decomposição, sem mudar a distribuição dos produtos gasosos [1, 20, 22, 23]. Este comportamento foi observado usando Ca e K suportados em carvão [19, 20, 22, 23]. O catalisador

quimissorve dissociativamente o N_2O aumentando o número de complexos de oxigénio menos estáveis à superfície, que se decompõem dando origem a CO_2 e a centros livres. A presença do catalisador parece favorecer a produção desses complexos de oxigénio à superfície, aumentando assim a decomposição de N_2O [1, 4, 18–24].

O objectivo deste trabalho é estudar o comportamento de misturas binárias contendo cobre, como catalisadores das reacções C-NO e C- N_2O .

Parte Experimental

Utilizou-se como suporte carvão activado comercial Charcoal Activated GR MERCK (com um tamanho de partículas de $30\ \mu m$, 1% de cinzas e 10% de humidade). A caracterização deste carvão por adsorção de N_2 a 77K revelou uma área específica (Langmuir) de $1289\ m^2/g$, um volume total de poros de $0.67\ cm^3/g$ e um volume de microporos de $0.22\ cm^3/g$. Este carvão foi impregnado por *incipient wetness* com soluções aquosas de acetato de Ba, Co, Cu, Fe, Mg, Mn, Ni, Pb e V (4% em peso de metal). Também se prepararam misturas bimetálicas de 4% Cu com 4% de cada um dos outros metais. Realizaram-se estudos cinéticos isotérmicos a várias temperaturas, usando um sistema termogravimétrico cuja composição dos sistemas gasosos estudados é de 0.5% de NO, N_2O ou CO_2 diluído em Ar.

Os estudos de conversão a temperatura programada foram realizados num reactor de leito fixo, tendo acoplado um GC/MS *on line*, equipado com uma coluna do tipo GS-Molesieve ($30m \times 0.541mm$). As amostras foram aquecidas usando programação de temperatura ($2^\circ C/min$) até $950^\circ C$, numa mistura de composição 0.5% NO, N_2O ou CO_2 diluído em He. Usou-se um caudal de $3.3\ cm^3/s$ e as amostras foram previamente tratadas a $500^\circ C$, em He durante 30 minutos, de modo a haver decomposição do sal precursor.

As fases presentes em condições reacionais foram identificadas por difracção de raios X *in situ*. Usou-se um aparelho Rigaku D/max III C com uma fonte

de radiação do tipo a Cu (Ka) (50 kV, 30 mA), equipado com uma célula especial de alta temperatura. Os ensaios foram realizados nas mesmas condições que os ensaios cinéticos.

Resultados e Discussão

Realizaram-se ensaios termogravimétricos a várias temperaturas com as misturas bimetalicas: Cu+Ba; Cu+Co; Cu+Fe, Cu+Mg; Cu+Mn; Cu+Ni; Cu+Pb; Cu+V e os respectivos sistemas monometálicos. Verificou-se que todas as misturas exibem maior actividade catalítica do que os sistemas monometálicos respectivos, e que o efeito não é apenas aditivo, sugerindo a existência de efeito sinérgico. No caso das misturas Cu+Ba e Cu+Mn, as velocidades de reacção aumentam entre 2 e 4 vezes, dependendo da temperatura e do gás usado.

Para as outras misturas, estes efeitos sinérgicos foram menos acentuados.

O aumento da actividade catalítica no caso das misturas bimetalicas, parece resultar de interacções cooperativas entre os componentes da mistura catalítica e os reagentes [1, 16].

A análise dos produtos de reacção (figura 1) permitiu detectar a formação de N_2O , N_2 , CO_2 e CO , juntamente com pequenas quantidades de NO não convertido.

Entre 300°C e 500°C foram detectados apenas CO_2 , N_2O e N_2 . Para temperaturas superiores a 500°C, forma-se algum CO , mas em pequenas quantidades. À medida que a concentração de CO_2 aumenta, maior é a conversão de NO . Analisando os produtos de reacção no caso da reacção não catalítica com NO (figura 2) observa-se um comportamento semelhante, mas neste caso a formação de CO_2 só é observada a temperaturas superiores a 500°C e por outro lado detectou-se maior quantidade de CO para temperaturas superiores a 550°C. Estes resultados sugerem que se dá a quimissorção dissociativa de NO e que o catalisador promove a formação de complexos $C(O)$. A decomposição destes complexos dá origem à formação de CO_2 e CO .

A figura 3 mostra a conversão de N_2O em função da temperatura programada, para as amostras de carvão sem catalisador e impregnadas com Cu, Ba e a mistura binária de Cu+Ba. O para a mistura de Cu+Ba. Comparando com a reacção não catalítica, a adição de catalisadores diminuiu substancialmente a temperatura de decomposição, obtendo-se conversões totais de N_2O . A figura 4 mostra a evolução dos produtos de reacção para a mesma mistura. A conversão de N_2O é praticamente completa a 350°C. Os produtos da reacção são N_2 e CO_2 , conforme verificado na literatura [1, 4, 18–20]. Observa-se apenas a formação de N_2 numa gama de temperaturas entre 100–200°C. A partir de 200°C detecta-se a formação de CO_2 , sendo observada estabilização de N_2 e CO_2 a 380°C. A partir dessa temperatura, a estequiometria dos produtos é aproximadamente 2:1, estando de acordo com o seguinte mecanismo [1, 4, 18–20]:



Após a estabilização dos produtos referidos, a partir de 750°C, detecta-se algum CO , tal como foi referido por Rodriguez-Mirasol *et al.* [4]. Este pode ser formado devido à reacção do CO com o carvão, de acordo com a reacção de inversa de Boudouard que é favorável a alta temperatura [1, 12].

Não se verifica alteração significativa na distribuição dos produtos com a temperatura, independentemente dos catalisadores utilizados. Tais resultados sugerem que o papel do catalisador é diminuir a temperatura de decomposição, sem mudar no entanto, a distribuição dos produtos. O mesmo foi observado por Rodriguez-Mirasol *et al.* usando outros catalisadores suportados em carvão [19, 20, 22, 23]. A decomposição de N_2O nos centros activos dos catalisadores parece dever-se à descentralização de carga do catalisador para os electrões não-ligantes do N_2O , desestabilizando a ligação N-O e provocando a quebra de ligação [1, 18, 23, 24]. Os catalisadores quimissorvem dissociativamente o N_2O e parecem favorecer a pro-

dução de complexos de oxigénio menos estáveis à superfície, dando origem a CO_2 e a centros activos livres, aumentando assim a decomposição de N_2O [1, 4, 18–24].

As fases activas também têm um papel importante na conversão dos gases [1, 5–8, 17, 18, 25]. As figuras 5 e 6 mostram os difractogramas de difracção de raios X para a amostra com Cu, obtida em N_2O , e a mistura binária de Cu+Mn, obtida em NO , a várias temperaturas. Verifica-se que na conversão de NO (figura 6), a 700°, os picos referentes ao CuO desaparecem, reaparecendo após o arrefecimento da amostra, sugerindo fusão desta fase. Comparando os difractogramas obtidos para os sistemas monometálicos e bimetalicos, não se verificou a existência de novas fases. Os picos mostram desvios para valores de 2θ mais baixos, à medida que a temperatura aumenta, revelando expansão da rede cristalina.

Os resultados de difracção de raios X obtidos *in situ*, mostraram que os sais precursores são decompostos e reduzidos a estados de oxidação mais baixos como CuO, Cu; Mn_3O_4 , MnO_2 . O efeito catalítico observado para a conversão pode ser explicado através de um mecanismo redox, em que as partículas dos óxidos são reduzidas pelo carvão, formando-se óxidos de estado de oxidação inferiores. A redução do óxido parece ser um factor que influencia a actividade catalítica do metal. Illán-Gomez *et al.* mostraram que existe uma relação entre a facilidade da oxidação-redução do catalisador (para estados de oxidação mais baixos) e a energia do óxido ou a energia livre da formação deste [7]. Estes autores observaram que nos ensaios realizados a temperatura programada, após quimissorção prévia do NO , não se formavam, a temperaturas baixas, nem N_2 nem N_2O . O catalisador era inactivo devido a estar oxidado, não havendo conversão de NO . Apenas após a formação de CO_2 , é que ocorre a conversão do NO , pois o CO_2 provém de grupos de oxigénio da superfície que se decompõem, deixando centros livres [7, 8].

Os resultados obtidos por difracção de raios X *in situ*, mostraram que após o

figura 1 Produtos de reacção obtidos na reacção de conversão de NO a temperatura programada, para mistura binária de Cu+Mn.

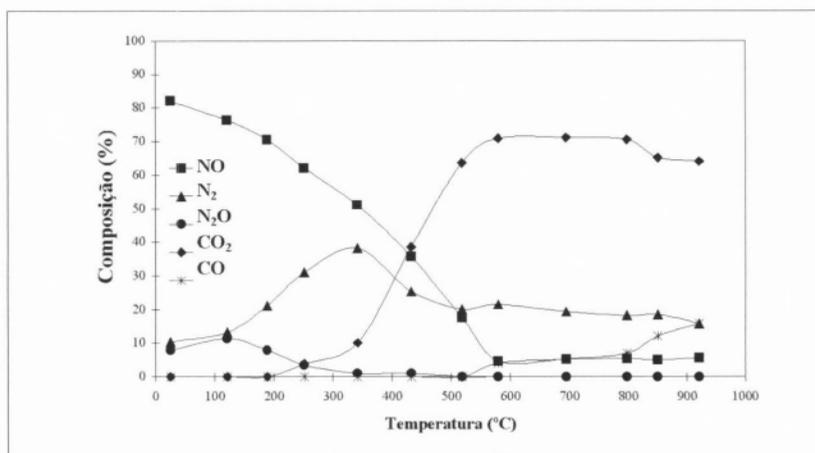


figura 2 Produtos de reacção obtidos na reacção de conversão de NO a temperatura programada, para a amostra de carvão sem catalisador.

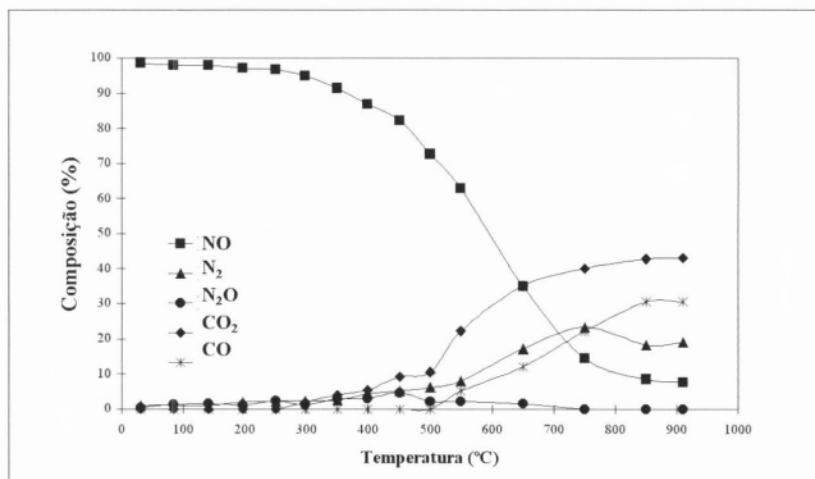
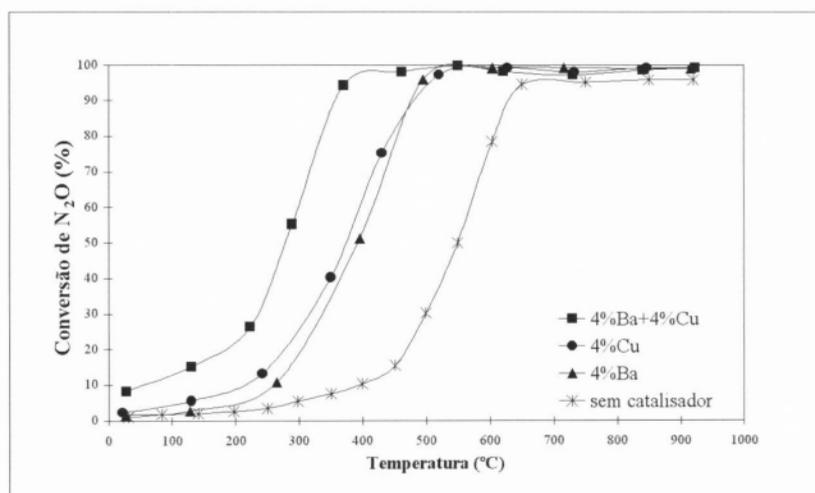


figura 3 Conversão de N₂O em função da temperatura programada, para as amostras de carvão sem catalisador e impregnadas com Cu, Ba e a mistura binária de Cu+Ba.



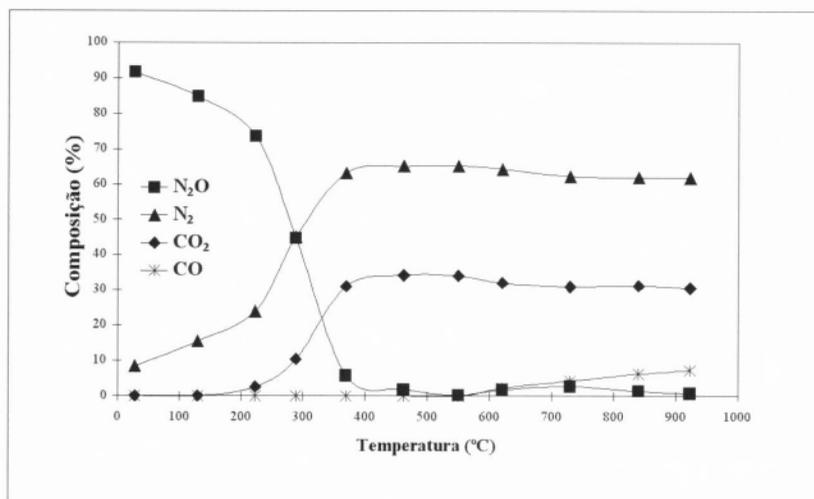


figura 4 Produtos de reação obtidos na reação de conversão de N_2O a temperatura programada, para mistura binária de Cu+Ba.

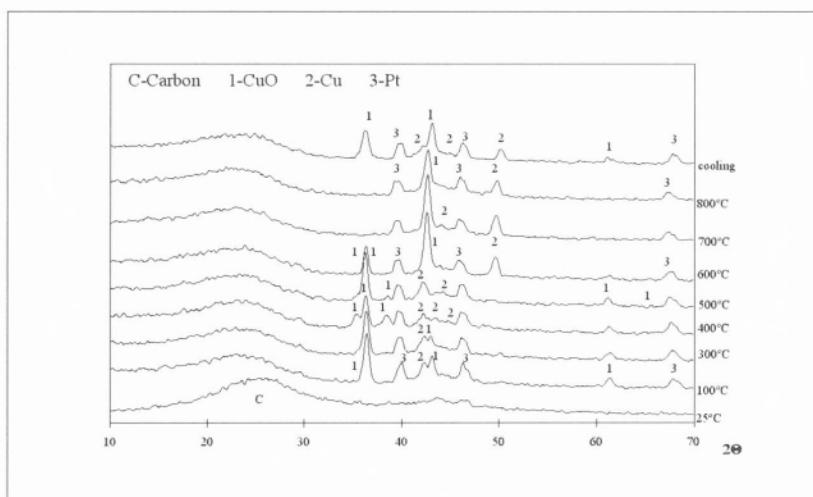


figura 5 Difratogramas de difração de raios X in situ, em atmosfera de N_2O , para a amostra impregnada com Cu, a várias temperaturas.

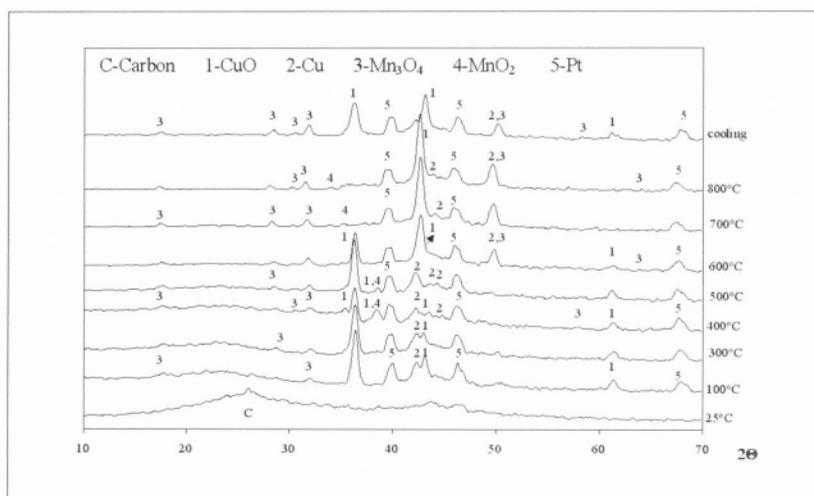


figura 6 Difratogramas de difração de raios X in situ, em atmosfera de NO , para a mistura binária de Cu+Mn, a várias temperaturas.

pré-tratamento da amostra a 500°C em atmosfera inerte, os óxidos são reduzidos pelo carvão a estados de oxidação inferiores. Parece ser necessária a existência do catalisador na forma reduzida para haver conversão de NO e N₂O. A fusão dos catalisadores e o facto destes "molharem" a superfície do carvão, parece promover a actividade catalítica, pois aumenta a interacção catalisador/carvão [1, 2, 12, 13, 17, 18, 25]. Desta forma, à medida que a dispersão aumenta, os processos cíclicos ocorrem em mais centros activos da superfície do carvão, aumentando a velocidade de gaseificação. Os catalisadores mais activos parecem actuar como aceitadores de oxigénio, transferindo-o para a superfície do carvão recuperando o estado reduzido, segundo o mecanismo atrás descrito. Um comportamento semelhante foi observado por vários autores em várias atmosferas [1, 5-10, 17, 18, 25-29].

Conclusões

Este estudo mostrou que os resultados obtidos por termogravimetria juntamente com a difracção de raios X *in situ* são importantes para interpretar o mecanismo da reacção. Para que o catalisador seja activo é necessário que este seja reduzido pelo carvão e oxidado pela fase gasosa. A capacidade do catalisador quimissorver os gases, passando por um processo redox de transferência de oxigénio para os centros activos do carvão, parece explicar a actividade catalítica.

Agradecimentos

Sónia Carabineiro agradece a Fundação para a Ciência e Tecnologia pela Bolsa de Doutoramento BD 1275/95.

Referências Bibliográficas

- 1.S.A.C. Carabineiro, Tese de Doutoramento, Universidade Nova de Lisboa, 2000.
- 2.R.T.K. Baker; C.R.F. Lund; J.J. Chludzinski Jr *J. Cat.* **1984**, 87, 255.
- 3.T. Okuhara; K.J. Tanaka *Chem. Soc. Faraday Trans* **1986**, 1, 2357.
- 4.J. Rodriguez-Mirasol; A.C. Ooms; J.R. Pels; F. Kapteijn; J.A. Moulijn *Combust. & Flame* **1994**, 99, 499.
- 5.M.J. Illán-Gomez; A. Linares-Solano; L. Radovic, C. Salinas-Martinez de Lecea *Energy & Fuels* **1995**, 9, 97.
- 6.M.J. Illán-Gomez; A. Linares-Solano; L. Radovic, C. Salinas-Martinez de Lecea *Energy & Fuels* **1995**, 9, 540.
- 7.M.J. Illán-Gomez; A. Linares-Solano; L. Radovic; C. Salinas-Martinez de Lecea *Energy & Fuels* **1995**, 9, 976.
- 8.M.J. Illán-Gomez; A. Linares-Solano; L. Radovic; C. Salinas-Martinez de Lecea *Energy & Fuels* **1995**, 10, 158.
- 9.D. Mehandjiev; M. Khristova; E. Bekyarova *Carbon* **1996**, 34, 757.
- 10.C. Marquez-Alvarez; I. Rodrigues-Ramos; A. Guerrero-Ruiz *Carbon* **1996**, 34, 339.
- 11.I. Aarna; E.M. Suuberg *Fuel* **1997**, 76, 475.
- 12.D.W. McKee in *Chemistry and Physics of Carbon*, Marcel Dekker Ed.; New York, **1981**; Vol.16, 1-118.
- 13.D.W. McKee *Carbon* **1970**, 8, 623.
- 14.I.F. Silva; L.S. Lobo *J. Cat.* **1990**, 126, 489.
- 15.I.F. Silva; D.W. McKee; L.S. Lobo *J. Cat.* **1997**, 170, 54.
- 16.I.F. Silva; C. Palma; M. Klimkiewicz; S. Eser *Carbon* **1998**, 36, 861.
- 17.S.A. Carabineiro; F.B. Fernandes; A.M. Ramos; J. Vital; I.F. Silva *Cat. Today* **1999**, 54, 559.
- 18.S.A. Carabineiro; F.B. Fernandes; A.M. Ramos; J. Vital; I.F. Silva *Cat. Today* **2000**, 57, 305.
- 19.J. Rodriguez-Mirasol, J.R. Pels, F. Kapteijn, J.A. Moulijn in Proc. 22nd Bi. Conf. Carbon, San Diego, CA, 1995, 620.
- 20.Z.H. Zhu, G.Q. Lu *J. Cat.* **1999**, 187, 262.
- 21.Z.H. Zhu, G.Q. Lu, Y. Zhuang, D. Shen *Energy & Fuels* **1999**, 13, 763.
- 22.Z.H. Zhu, L.R. Radovic, G.Q. Lu *Carbon* **2000**, 38, 451.
- 23.F. Kapteijn F, J. Rodriguez-Mirasol, J.A. Moulijn *Appl. Cat. B: Env.* **1996**, 9, 25.
- 24.A. Dandekar, M.A. Vannice *Appl. Cat. B: Env.* **1999**, 22, 179.
- 25.S.A. Carabineiro, D.W. McKee, I.F. Fonseca *Carbon* **2000**, 39, 451.
- 26.D.W. McKee *Fuel* **1980**, 59, 308.
- 27.D. Cazorla-Amorós, A. Linares-Solano, C. Salinas-Martinez de Lecea, J.P. Joly *Carbon* **1991**, 29, 361.
- 28.R. Meijer, M. Weeda, F. Kapteijn, J. Moulijn *Carbon* **1991**, 29, 929.
- 29.A. Perez-Florindo, D. Cazorla-Amorós, A. Linares-Solano *Carbon* **1993**, 31, 493.

Cinquentenário da Simulação Computacional em Mecânica Estatística

I. Os primeiros passos

FERNANDO M. S. SILVA FERNANDES*

1. Introdução

Em Junho de 2003 passaram cinquenta anos desde a publicação, no *Journal of Chemical Physics*, do célebre artigo "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines" da autoria de Nicholas Metropolis, Arianna e Marshall Rosenbluth, e Augusta e Edward Teller [1]. Este trabalho marca, historicamente, a entrada definitiva do método de Monte Carlo e da simulação computacional na mecânica estatística.

Durante os cinquenta anos da sua existência, a simulação computacional estabeleceu-se como um domínio interdisciplinar em estreita ligação com diversas áreas teóricas e experimentais. Considerando o desenvolvimento do conhecimento, cada vez mais refinado, dos princípios científicos fundamentais e a produção acelerada de hardware e software computacionais, pode afirmar-se que a simulação computacional é um domínio do futuro.

É justo, por conseguinte, que se assinale o meio-século de vida da simulação computacional em mecânica estatística, recordando o seu nascimento, desenvolvimento e as aplicações mais relevantes. Tanto mais que, em Portugal, existem grupos de investigação que a utilizam e desenvolvem, ela faz parte dos currículos de licenciaturas e mestrados, e são realizados doutoramentos nesse domínio.

Nos Estados Unidos, em Los Alamos [2], o berço do nascimento do método de Monte Carlo, a efeméride foi comemorada com uma Conferência Interna-

cional em Junho de 2003. A Divisão de Química-Física, da Sociedade Portuguesa de Química, promoverá um Colóquio sobre o tema durante 2003.

Neste artigo, descrevemos os primeiros passos do método de Monte Carlo. Num próximo artigo, abordaremos o desenvolvimento e perspectivaremos o futuro da simulação computacional.

2. O nascimento

A simulação computacional é, naturalmente, uma consequência directa da construção dos primeiros computadores electrónicos na década de 1940–50. Neste contexto, o melhor representante é o ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) construído em 1946 por J.P. Eckert e J.W. Mauchly na Universidade da Pensilvânia, EUA. Foi nesta máquina que von Neumann, Ulam, Metropolis e Frankel realizaram alguns cálculos numéricos estocásticos sobre a difusão de neutrões em processos nucleares. Numa conferência em Los Alamos, Abril de 1946, eles descreveram as potencialidades da máquina e Ulam sugeriu que a velocidade de cálculo desses equipamentos poderia possibilitar o uso, em larga-escala, de técnicas de amostragem estatística para a resolução de problemas físicos e matemáticos, as quais não eram mais do que as precursoras do actual método de Monte Carlo.

A ideia, contudo, era mais velha! Na verdade, Segrè [3] relata: "Eu sei que Fermi tinha inventado, mas não designado o método de Monte Carlo quando, ainda

em Roma, investigava a moderação de neutrões. Nada publicou sobre o assunto, mas usou o método para resolver muitos problemas recorrendo a quaisquer instrumentos de cálculo disponíveis, em particular uma pequena máquina de somar mecânica". Curiosamente, em 1947, enquanto o ENIAC esteve desactivado, durante a sua transferência para a Universidade de Aberdeen, Maryland, Enrico Fermi inventou e construiu com P. King um pequeno computador analógico para realizar cálculos sobre a difusão de neutrões [4].

Estes factos merecem ser recordados, não só pelo seu valor histórico, mas também porque contrastam com uma atitude actual generalizada, particularmente das pessoas mais novas, no que diz respeito ao material informático. O espectacular desenvolvimento de hardware e software e a constante descida de preços, convida a que se desprezem, da noite para o dia, máquinas em condições ainda óptimas para a realização de cálculos científicos. Máquinas que teriam feito as delícias de Enrico Fermi! Quantos "cemitérios" de material informático se evitariam se esses processadores fossem utilizados para constituir "clusters" de alto desempenho. E quantos resultados originais se produziriam, a baixo custo, desde o momento que não faltassem as ideias que os computadores não podem, de todo, formalizar.

Quanto ao nome "Monte Carlo" parece ter sido Metropolis [4] o primeiro a pensar nele numa conversa com Ulam, em 1947, sobre as técnicas estocásticas para o estudo da difusão de neutrões. O

* Laboratório de Simulação Molecular e CECUL, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa

nome surge, pela primeira vez, no título de um artigo de Metropolis e Ulam [5] em 1949.

Seria injusto, contudo, não destacar o papel crucial de von Neumann neste contexto. John von Neumann, nascido na Hungria, foi uma das mentes mais brilhantes e rápidas do século XX. Aos seis anos de idade dividia, mentalmente, números com oito algarismos e falava com o Pai em grego antigo. Aos vinte e seis anos lançou os fundamentos rigorosos da mecânica quântica, com base no conceito de espaço de Hilbert [6]. No início dos anos 30 estabeleceu-se definitivamente nos Estados Unidos e foi, juntamente com Albert Einstein, um dos primeiros residentes do reputado Instituto de Estudos Avançados de Princeton, criado em 1933. As suas contribuições estendem-se desde a matemática e física até à ciência dos computadores, robótica e autómatos celulares. Foi ele que implementou a ideia de "programa residente", isto é, a máquina ser controlada por software interno e não, como no caso do ENIAC, por um processo externo e complicado de ligações por hardware. Embora a origem da ideia seja obscura (não se sabe exactamente se foi dele, dos construtores do ENIAC, Eckert e Mauchly, ou do matemático inglês Alan Turing, o qual introduziu o conceito de "máquina de Turing", a base formal dos computadores) parece não restarem dúvidas que foi von Neumann que a efectuou num protótipo que construiu no Instituto de Princeton [7]. Tendo estado envolvido no projecto Manhattan, em Los Alamos, colaborou, como referimos, no estudo dos processos estocásticos, isto é, processos que evoluem no tempo sujeitos a flutuações aleatórias. Eles são, afinal, o cerne do método de Monte Carlo. Para os implementar numericamente é imprescindível um bom gerador de números aleatórios. John von Neumann foi pioneiro no seu desenvolvimento e implementação [8-10]

A ideia da amostragem estatística numérica tem, no entanto, uma origem ainda mais antiga [11]. Por exemplo, Lord Kelvin [12] utilizou técnicas de amostragem aleatória para inicializar

trajectórias de partículas sujeitas a colisões elásticas com as paredes de recipientes de diferentes formas. Isto em relação à disputa, no início do século XX, sobre as falhas do princípio da equipartição de energia e os fundamentos da mecânica estatística. Lord Kelvin agradeceu ao seu secretário, William Anderson, por ter realizado os cálculos para mais de 5000 colisões!

Quando em Março de 1952, o célebre computador MANIAC (Mathematical

$$\langle f \rangle = (1/Q) \sum_{i=1}^M f(i) \exp[-\beta E(i)] \quad \text{com} \quad Q = \sum_{i=1}^M \exp[-\beta E(i)]$$

(1)

Analysar, Numerator, Integrator And Computer), um sucessor do ENIAC, entrou em funcionamento em Los Alamos, Nicholas Metropolis estava interessado em resolver um conjunto grande e variado de problemas de modo a avaliar a estrutura lógica da máquina e a demonstrar as suas capacidades. O clássico problema dos N-corpos da mecânica estatística, através de técnicas estocásticas, foi um dos primeiros problemas resolvidos por Metropolis, conjuntamente com os Rosenbluth e os Teller, conduzindo ao desenvolvimento do que é actualmente conhecido por método de Monte Carlo de Metropolis. A sua cédula de nascimento é o artigo mencionado na introdução.

O neófito teve, no entanto, alguns problemas de identidade e sobrevivência. Para os enquadrar, é conveniente recordarmos a ideia fundamental do método.

3. O método

O objectivo essencial de método de Metropolis é estimar médias de propriedades mecânicas (energia e pressão, por exemplo) sobre um conjunto (ensemble) de configurações, gerado através de um passeio aleatório no espaço configuracional dum sistema com temperatura, volume e número de moléculas constantes. O conjunto de configurações nas condições termodinâmicas referidas, designa-se por ensemble canónico.

O espaço configuracional do sistema é representado por um conjunto com um número finito (M) de configurações (estados), cada uma identificada pelas coordenadas de cada molécula. Por definição, uma propriedade mecânica, f, depende das coordenadas moleculares, portanto encontra-se definida para cada configuração do ensemble. A média canónica dessa propriedade sobre os M estados do ensemble é dada, de acordo com a mecânica estatística, por:

em que E(i) é a energia potencial do estado i; $\beta=1/kT$, onde k é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta, e Q a função de partição.

Se cada configuração do ensemble for simplesmente gerada com probabilidade uniforme e a média da propriedade mecânica, $\langle f \rangle$, for realizada afectando f(i) do peso do factor de Boltzmann, $\exp[-\beta E(i)]$, conforme a equação anterior sugere, então o método será ineficiente. De facto, um número substancial de configurações terá moléculas sobrepostas implicando uma elevada energia potencial, ou seja um factor de Boltzmann muito pequeno. A sua contribuição será, então, irrelevante para a média canónica da propriedade.

A ideia genial de Metropolis, e colaboradores, foi substituir o método anterior, sugerido pela aplicação directa da equação (1), por um processo totalmente equivalente, mas operacionalmente eficiente: *as configurações são geradas com probabilidade proporcional ao factor de Boltzmann e pesadas uniformemente em vez de, como a equação (1) sugere, gerar as configurações uniformemente e pesá-las com o factor de Boltzmann*. Basta que se garanta a convergência estocástica do processo, isto é, que cada configuração no ensemble ocorra com uma frequência proporcional ao factor de Boltzmann.

Uma vez lavrada a prescrição é necessário aviar a receita. Metropolis *et al.*[1]

executaram o passeio aleatório através da realização de uma cadeia de passos sucessivos, designada por cadeia de Markov [13,14], a qual é completamente especificada pela respectiva matriz de probabilidades de transição, cujo elemento genérico, $p(i, j)$, é a probabilidade condicional do sistema, estando no estado i no passo n do processo, transitar para o estado j no passo $(n+1)$. Então, a estimativa de Monte Carlo da média da propriedade f , será:

$$\bar{f}^{(m)} = (1/m) \sum_{n=1}^m f(i(n))$$

(2)

realizada sobre um número suficientemente grande de m passos, sendo $i(n)$ o estado do sistema no passo n do passeio aleatório.

Uma condição suficiente para que, com o aumento de m , a estimativa anterior, $\bar{f}^{(m)}$, conviria estocasticamente para a média canónica $\langle f \rangle$, é que a probabilidade de transição $p(i, j)$ satisfaça a condição de reversibilidade microscópica:

$$\exp[-\beta E(i)]p(i, j) = \exp[-\beta E(j)]p(j, i)$$

(3)

Num artigo recente [15] mostrámos que a equação anterior significa que, no limite da convergência, o número de estados i que transitam para o estado j é igual ao número de estados j que transitam para o estado i . Isto é, estabelece-se um equilíbrio dinâmico semelhante ao que se verifica nos processos cinéticos reversíveis de 1.ª ordem, em que a velocidade da reacção directa iguala a da reacção inversa.

A implementação prática do processo é realizada considerando:

$$p(i, j) = \alpha(i, j) q(i, j) \quad (4)$$

onde $\alpha(i, j)$ é uma matriz estocástica simétrica e normalizada:

$$\sum_{j=1}^M \alpha(i, j) = 1, \quad i = 1, 2, \dots, M$$

(5)

designada por matriz subjacente da cadeia, e

$$q(i, j) = 1 \text{ se } E(j) \leq E(i) \quad (7)$$

$$q(i, j) = \exp[-\beta(E(j) - E(i))] = \exp(-\beta\Delta E) \text{ se } E(j) > E(i)$$

(8)

A condição de normalização da matriz estocástica da cadeia de Markov é satisfeita impondo que: a probabilidade do sistema, estando no estado i no passo n do processo, "transitar" para o mesmo estado i , no passo $(n+1)$, é:

$$p(i, i) = 1 - \sum_{j \neq i} p(i, j)$$

(9)

Na implementação usual do método, a matriz subjacente $\alpha(i, j)$ corresponde a seleccionar, com probabilidade uniforme, um estado j a partir de um número, N_v , de estados vizinhos do estado i . Assim, $\alpha(i, j) = 1/N_v$ e a equação (7) traduz uma transição incondicional para o estado j se a energia decrescer ou se mantiver. Se a energia aumentar, o estado j será aceite com probabilidade inferior à unidade, $\exp(-\beta\Delta E)$, de acordo com a equação (8). Se o estado j for rejeitado, então, a condição de normalização (9) impõe que se recontem o estado i como um novo elemento do ensemble, isto é, o acontecimento $i(n+1) = i(n)$ com probabilidade condicional $1 - \exp(-\beta\Delta E)$.

É de salientar que o método de Metropolis apenas faz a amostragem do espaço configuracional. As contribuições do espaço das velocidades são calculadas analiticamente e adicionadas no final dos cálculos. Isto contrasta, como veremos, com o método da dinâmica molecular, e algumas variantes do método de Monte Carlo, onde ambos os espaços são amostrados simultaneamente.

Finalmente, é importante destacar um aspecto fundamental do método. A função de partição, Q , da expressão (1) contém toda a informação sobre o sistema, de acordo com a mecânica estatística. Assim, o ideal seria calcular essa função e, a partir dela, obter todas as propriedades do sistema. Ora este é o grande problema operacional da mecânica estatística. De facto, aparte alguns

casos triviais (gás e cristal perfeitos) e o brilhante "tour de force" de Onsager sobre o modelo bidimensional de Ising [16], o cálculo da função de partição é impraticável para a maioria dos sistemas. Repare-se, no entanto, que a probabilidade de transição $\exp(-\beta\Delta E) = \exp[-\beta E(j)] / \exp[-\beta E(i)]$, na equação (8) do algoritmo de Metropolis, evita o cálculo da função de partição. Na verdade, ela é simplesmente eliminada quando se faz a razão das probabilidades dos estados j e i respectivamente, uma vez que a função de partição não é mais do que o factor de normalização da distribuição de Boltzmann.

4. Os problemas

A justificação do método de Monte Carlo, apresentada na secção anterior, é a que consta em alguns livros de texto actuais [17,18] e foi despida de ambiguidades ao longo dos últimos cinquenta anos. Mas quem leia a cédula de nascimento do método, isto é, o artigo de Metropolis *et al.* [1] já mencionado, aperceber-se-á de que as coisas não estavam tão bem fundamentadas nessa época. É uma característica típica das grandes realizações científicas. Que, infelizmente, nem sempre destacamos na nossa actividade docente.

Não é de estranhar, então, que pouco depois da publicação do método em Junho de 1953, tenha entrado em cena John Kirkwood, uma das respeitáveis autoridades em mecânica estatística, sugerindo que o método estava errado! É interessante analisar as suas objeções e as razões intrínsecas do seu cepticismo.

Kirkwood era consultor do Laboratório de Los Alamos e teve conhecimento dos trabalhos de Metropolis e colaboradores antes da referida publicação. De início, apercebeu-se das grandes potencialidades do método e estimulou jovens doutorados sob a sua orientação (como W.W. Wood) a integrarem essas originais investigações.

O artigo de Metropolis *et al.* [1], de 1953, simulou a equação de estado dum sistema de discos rígidos comparando-a com as previsões da teoria do

volume livre e com a expansão do virial. O acordo obtido foi excelente. Entretanto, Marshall e Arianna Rosenbluth aplicavam o método ao estudo da equação de estado das esferas rígidas cujo artigo veio a ser publicado em 1954 [19]. O objectivo principal era analisar o problema das transições de fase e comparar os resultados das simulações com a teoria do volume livre, a expansão do virial e com a então recente teoria da sobreposição de Kirkwood e Born-Green-Yvon [20]. Esta última, constituía um significativo avanço na teoria dos líquidos e vários estudantes de Kirkwood tinham dedicado grande parte das suas teses de doutoramento à resolução numérica da equação teórica, o que não era trivial com o equipamento computacional da época. Mas o trabalho dos Rosenbluth disparou uma seta ao coração da teoria de Kirkwood quando concluiu: "The [simulated] equation of state for three-dimensional hard spheres casts doubt on the adequacy of the superposition approximation at high densities". É fácil compreender que o entusiasmo inicial de Kirkwood sobre o método de Monte Carlo tenha diminuído e que tenha informado Marshall Rosenbluth, em Novembro de 1953, que estava convencido de que o método de Monte Carlo estava errado [4]. Um ar gelado desceu sobre Los Alamos! Mas vejamos os argumentos de Kirkwood.

A primeira objecção referia-se ao processo de recontagem do estado i quando o estado j foi rejeitado, o qual referimos na secção anterior. Na opinião de Kirkwood o estado $i(n)$ não deveria ser recontado, mas novos estados deveriam ser gerados até que um fosse aceite. M. Rosenbluth fez uma nova demonstração do método e, juntamente com W.W. Wood, estudou sistemas com soluções analíticas exactas para as comparar com os resultados das simulações. Após esta intensa labuta, o grande Kirkwood manifestou-se convencido sobre a necessidade do processo de recontagem e Los Alamos rejubilou. Mas foi paz de pouca duração!

Em Janeiro de 1954, Kirkwood entra em cena novamente com outro problema. Dizia que o método dava tratamento

preferencial à transição para os estados de menor energia através das equações (7) e (8). Quanto a ele, a probabilidade $q(i, j)$ deveria ser sempre simétrica, isto é, dada pelo que ele designou como a regra de Kahan expressa pela equação (10):

$$q(i, j) = \frac{\exp[-\beta E(j)]}{\exp[-\beta E(i)] + \exp[-\beta E(j)]} \quad (10)$$

Rosenbluth e Wood concordaram que a equação (10) era válida, mas também estavam seguros que o par de equações (7) e (8) estava correcto e, intuitivamente, sentiam que era o melhor. Reiniciou-se uma intensa discussão, até que, em Abril de 1954, Wood [4] recebeu o veredicto final de Kirkwood: "I was finally able to find the time to devote a weekend to thinking about the Monte Carlo problem". Continuou, dizendo que admitia o par de equações (7) e (8) como "one of the correct ones". Mas, rematou: "Marshall's arguments were at no time helpful and your modes of exposition were opaque"!

A partir desse momento, Kirkwood foi um activo promotor do método de Monte Carlo dando-o a conhecer nos seus importantes contactos científicos. Que belo e estimulante testemunho de humildade científica!

É importante sublinhar que tanto o par de equações (7) e (8) como a equação (10) são válidas como probabilidades de transição. Na verdade, a escolha não é única. Basta que obedeça à condição da reversibilidade microscópica como é o caso daquelas equações, o que os leitores poderão facilmente verificar. Este é um dos aspectos mais poderosos do método de Monte Carlo. A intuição do grupo de Los Alamos sobre a vantagem do par (7) e (8) está hoje bem justificada [17]. De facto, essas probabilidades de transição minimizam, em geral, a variância estatística das médias de Monte Carlo. Como tal, são as usualmente utilizadas. Mas isso não significa que, em aplicações específicas, não seja vantajoso utilizar outras probabilidades de transição.

5. Comentários finais

O método de Monte Carlo sobreviveu às suas dores intestinais e é hoje uma ferramenta poderosa em mecânica estatística bem como em outras áreas teóricas e experimentais. Em 1957, Alder e Wainwright lançaram o método da dinâmica molecular, o equivalente determinístico do método de Monte Carlo. A aliança entre os dois métodos [21, 22] demonstrou, inequivocamente, a existência de uma transição de fase fluido-sólido para o sistema de esferas rígidas, um fenómeno de crucial importância para a compreensão da estrutura dos líquidos e dos sólidos. Ainda em 1957, Wood e Parker [23] aplicaram o método de Monte Carlo a um estudo detalhado do sistema de Lennard-Jones. Estas grandes realizações levaram Temperley [24] a afirmar: "A key year for liquid state physics was 1957".

O dealbar da década de 1960 aproximava-se e nela iriam aparecer consideráveis desenvolvimentos e aplicações, a par do incremento do poder computacional. O ciclo da adolescência da simulação computacional em mecânica estatística completar-se-ia, e ela iria definitivamente entrar, na década de 70, na idade adulta. Mas estes aspectos ficarão para o próximo artigo onde referiremos, também, o início da simulação computacional em Portugal.

Agradecimentos

O autor agradece reconhecidamente ao avaliador deste artigo as sugestões relativas a um maior destaque das contribuições de John von Neumann e ao facto do algoritmo de Metropolis evitar o cálculo da função de partição.

Referências

- [1] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087 (1953).
- [2] Web site do Laboratório Nacional de Los Alamos: www.lanl.gov/worldview

- [3] E. Segrè, *From X-rays to Quarks*, W.H. Freeman, San Francisco, Cal., 1980.
- [4] W.W. Wood, em *Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi"*, North-Holland, pág. 3, 1986.
- [5] N. Metropolis, S. Ulam, *J. Am. Stat. Assoc.*, **44**, 335 (1949).
- [6] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1955.
- [7] E. Regis, *Who Got Einstein's Office?*, Penguin Books, Londres, 1987.
- [8] J. Halton, *SIAM Rev.*, **12**, 1 (1970).
- [9] J. von Neumann, *NBS Appl. Math. Series*, **12**, 36 (1951).
- [10] J. von Neumann, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **51**, 660 (1945).
- [11] J.M. Hammersley, D.C. Handscomb, *Monte Carlo Methods*, Chapman and Hall, London, 1964.
- [12] Lord Kelvin, *Philos. Mag.*, **(6)2**, 1 (1901).
- [13] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Vol. I, 3.ª edição, John Wiley & Sons, 1970.
- [14] G.G. Lowry, J.M. Myhre, M. Fluendy, em *Markov Chains and Monte Carlo Calculations in Polymer Science*, ed. G.G. Lowry, Marcel Dekker, Inc., 1970.
- [15] F.M.S.S. Fernandes, *Rev. Ciência, Série VII*, **2**, 31 (2001).
- [16] L. Onsager, *Phys. Rev.*, **65**, 117 (1944).
- [17] M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [18] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*, 2.ª Edição, Academic Press, 2002.
- [19] M. Rosenbluth, A. Rosenbluth, *J. Chem. Phys.*, **22**, 881 (1954).
- [20] J. Kirkwood, E.K. Maun, B.J. Alder, *J. Chem. Phys.*, **18**, 1040 (1950).
- [21] B.J. Alder, T.E. Wainwright, *J. Chem. Phys.*, **27**, 1208, (1957).
- [22] W.W. Wood, J.D. Jacobson, *J. Chem. Phys.*, **27**, 1207, (1957).
- [23] W.W. Wood, F.R. Parker, *J. Chem. Phys.*, **27**, 720, (1957).
- [24] H.N.V. Temperley, J.S. Rowlinson, G.S. Rushbrooke, *Physics of Simple Liquids*, pág. 7, Wiley, New York, 1968.



Equipamento de Laboratório

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

Vidros e Plásticos de Laboratório

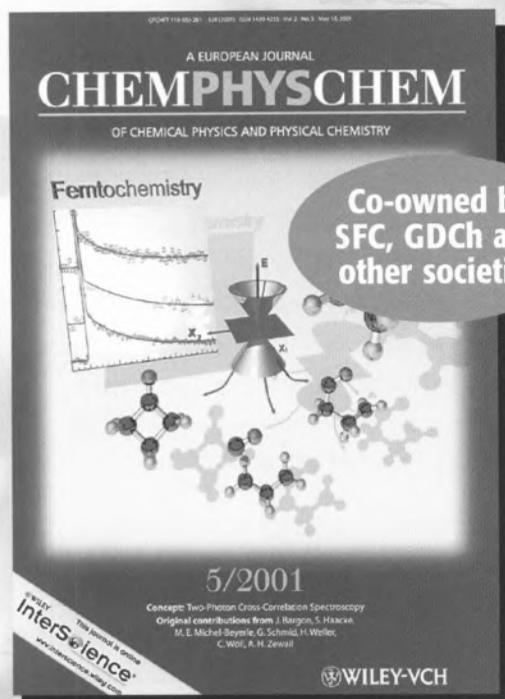
Distribuidores NORMAX

Material Didático

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

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

Subscribe Now!



ChemPhysChem

A European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry

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

ChemPhysChem – Where Chemistry Meets Physics Meets Chemistry...

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

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

Papers from distinguished scientists worldwide, such as

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

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

Virtual Sample Copy: FREE online access to full text of sample copy:
www.interscience.wiley.com

Please enter my/our 2002 subscription to ChemPhysChem

At the institutional rate*:

- € 598,-
 sFr 1028,-
 US\$ 648,-

electronic

- € 598,-
 sFr 1028,-
 US\$ 648,-

At the personal member rate:

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

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

Please tick: private business

Name

Address

City/Postcode

Country

Date/Signature

Please send me a free sample copy

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

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

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

WILEY-VCH

Os Polioxometalatos. Do Anião de Keggin às Nanocápsulas

JOSÉ GAMELAS*, ANA CAVALEIRO, ISABEL SANTOS, MARIA SALETE BALULA

Resumo

Uma grande parte da investigação que se faz em Química tem como objectivo a síntese e estudo de compostos químicos (ou materiais) que possuam certas propriedades desejadas: um material com determinadas propriedades condutoras da corrente eléctrica, uma substância que catalise um certo tipo de reacções químicas, um composto inibidor da acção de vírus (ou bactérias) prejudiciais à saúde, etc. A obtenção de substâncias capazes de desempenhar múltiplas funções é, neste contexto, um de-

safio máximo que se propõe ao investigador. Neste artigo, pretende-se apresentar ao leitor um tipo particular de espécies químicas, os polioxometalatos. Estes aniões apresentam um conjunto de propriedades estruturais e electrónicas que os tornam úteis em áreas tão diversas como a catálise, medicina, ciência dos materiais ou química analítica. Considerações sobre a síntese, propriedades e aplicações mais relevantes dos polioxometalatos serão aqui contempladas.

1. Introdução. Perspectiva histórica

Os polioxometalatos (de fórmula geral $[M_xO_y]^{m-}$ ou $[X_zM_xO_y]^{n-}$, $z \leq x$, $M = Mo, W, V, Nb, Ta$ e X variável) são aniões que se podem estruturalmente visualizar como agregados obtidos a partir da condensação de poliedros metal-oxigénio, MO_x : octaedros (o mais frequente), bipirâmides pentagonais ou pirâmides quadrangulares, em que o metal M está deslocado da posição central do poliedro em direcção aos oxigénios não partilhados (devido à formação de ligações π M-O). [1-6] Nas figuras 1 e 2 ilustram-se as estruturas de alguns tipos de polioxometalatos conhecidos.

O primeiro polioxometalato que se conhece foi preparado em 1826 quando Berzelius obteve um precipitado amarelo da reacção entre molibdato de amónio e ácido fosfórico, o 12-molibdofosfato de amónio. A partir desta descoberta, diversos polioxomolibdatos ($M=Mo$) e polioxotungstos ($M=W$) foram referi-

dos, sendo valorizada a sua aplicação em química analítica, para determinações gravimétricas tais como as de P ou Si. Só nas primeiras décadas do século XX serão propostas as primeiras teorias para explicar a estrutura deste tipo de compostos (teoria de coordenação de Werner, teoria de Miolati-Rosenheim, proposta estrutural de Pauling). A mais "correcta" foi a de Linus Pauling, que em 1929, propôs estruturas baseadas em octaedros MO_6 ligados entre si por partilha de vértices de oxigénio. [2,4,6] A determinação estrutural do heteropolíácido $H_3[PW_{12}O_{40}] \cdot 6H_2O$ (actualmente formulado como $[H_5O_2]_3[PW_{12}O_{40}]$) feita por Keggin em 1933 foi o primeiro grande passo para compreender a estrutura deste tipo de compostos. Com base no correspondente difractograma de raios X de pós, mostrou que o anião apresenta uma estrutura compacta baseada num arranjo de octaedros WO_6 ligados entre si por partilha de arestas e vértices de oxigénios (figura 1c). [9]

A síntese de novos polioxometalatos teve grande desenvolvimento durante todo o século XX. No entanto, dado as grandes dimensões e complexidade estrutural da maior parte destes aniões a sua caracterização sempre se apresentou de grande dificuldade até há relativamente pouco tempo. Nos anos 60, os estudos de caracterização limitavam-se, em geral, a análises químicas (grande empenho na exactidão/precisão das determinações analíticas), determinação de massas molares, estudos polarográficos, caracterização por espectroscopia vibracional e electrónica. As determinações cristalográficas eram escassas (até 1971, segundo um artigo de revisão, registavam-se cerca de 25 e algumas destas com pouca qualidade) e certas técnicas não tinham, ainda, sensibilidade suficiente para o estudo deste tipo de compostos. [1,2,4,6] Hoje, com o desenvolvimento das técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (^{183}W , ^{95}Mo , ^{17}O), difracção de raios X de monocristal e espectrometria de massa, entre ou-

* Departamento de Química, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal

*E-mail: jgameelas@dq.ua.pt

figura 1 Representação poliédrica da estrutura de vários polioxometalatos. a) anião de Lindqvist, $[W_6O_{19}]^{2-}$; b) anião de Andersen, $[TeMo_6O_{24}]^{6-}$; c) anião de Keggin, $[PW_{12}O_{40}]^{3-}$; d) anião de Dawson, $[P_2W_{18}O_{68}]^{6-}$; e) $[Co_4(H_2O)_2(PW_9O_{34})_2]^{10-}$. [2] Observe-se a presença de octaedros MO_6 em todos os aniões.

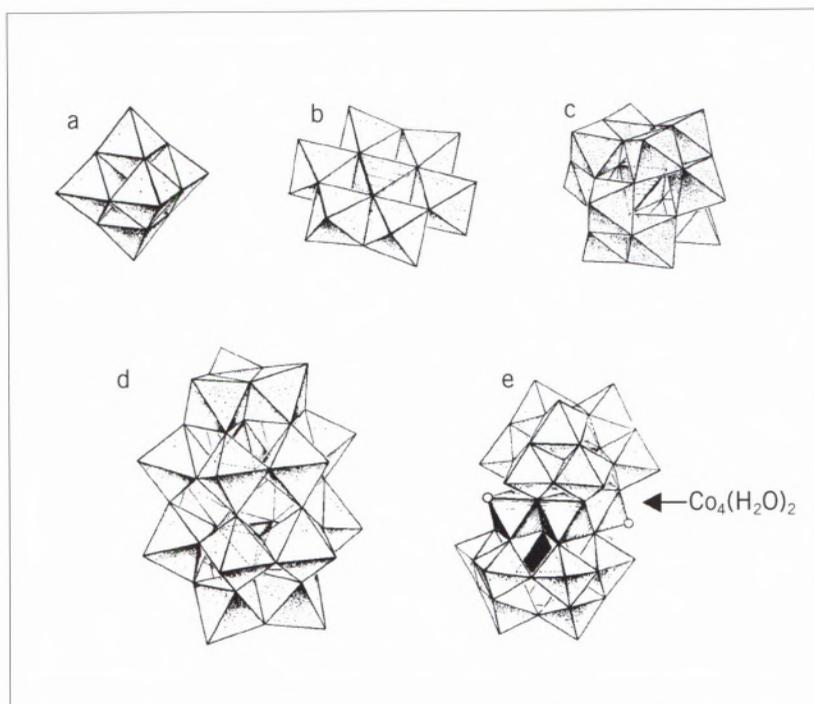
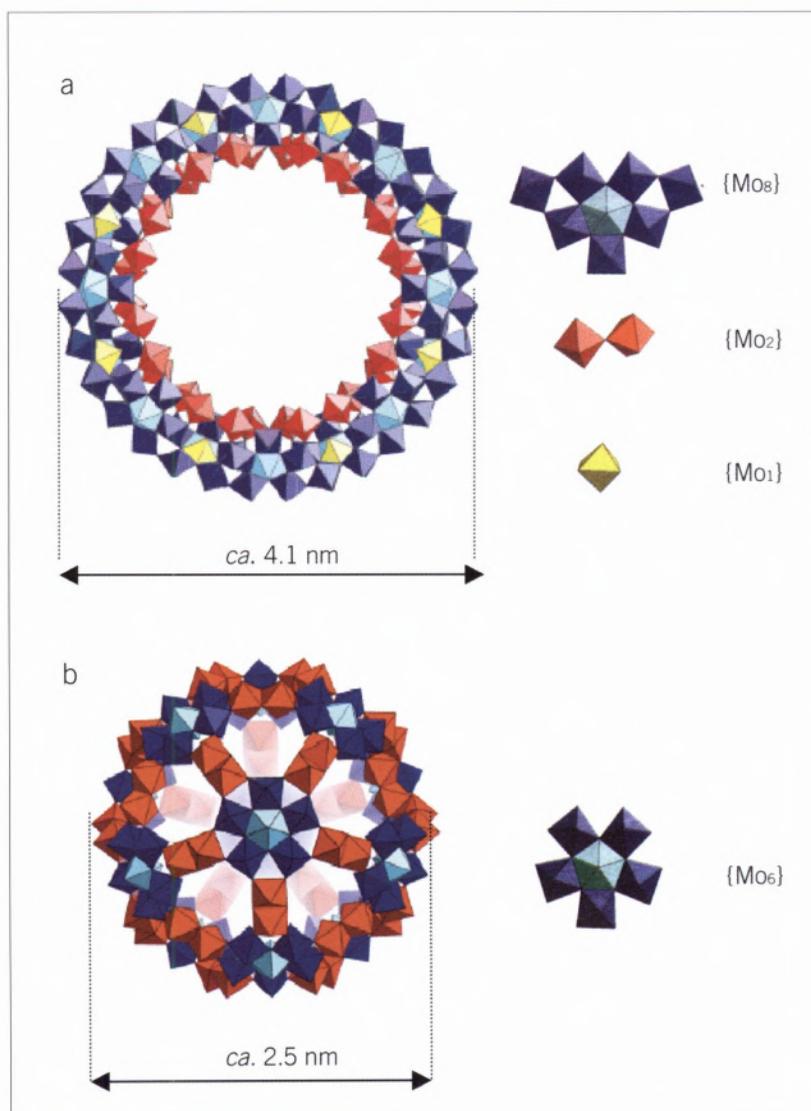


figura 2 Representação poliédrica da estrutura de polioxometalatos de grandes dimensões e dos respectivos fragmentos constituintes.

a) $[Mo_{176}O_{528}(H_2O)_{80}H_n]^{(32-n)-} = \{Mo_{176}\}$; [7]
 b) $[Mo_{132}O_{372}(CH_3COO)_{30}(H_2O)_{72}]^{42-} = \{Mo_{132}\}$.
 [8] Na estrutura **a** com forma semelhante a um anel, fragmentos $\{Mo_8\}$ estão ligados entre si por intermédio dos fragmentos $\{Mo_2\}$ e $\{Mo_1\}$ (estes localizados no plano equatorial do anel). Na estrutura **b** com forma aproximadamente esférica, os vários fragmentos $\{Mo_6\}$ ligam-se entre si por intermédio de pontes $\{Mo_2O_4(CH_3COO)\}$.



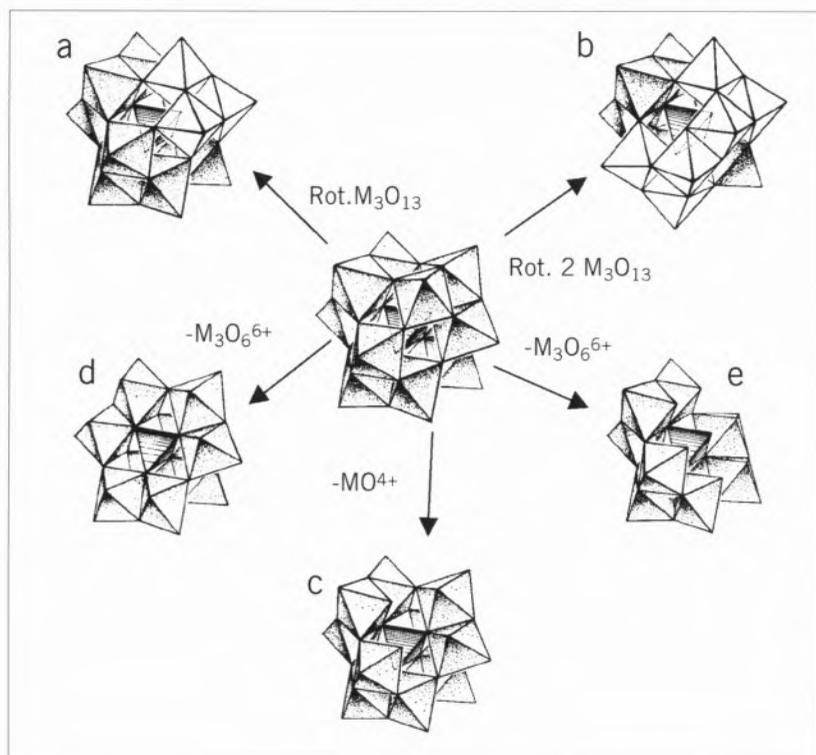


figura 3 Representação poliédrica da estrutura dos isômeros do anião de Keggin, β e γ (a e b, respectivamente) e das espécies lacunares do anião de Keggin: monolacunar, α -[XM₁₁O₃₉]^{(p+4)-} (c) e trilacunares, α -A-[XM₉O₃₄]^{(p+6)-} (d) e α -B-[XM₉O₃₄]^{(p+6)-} (e) e sua relação com o anião de Keggin (centro da figura). [2]

tras, já é possível obter uma informação estrutural mais precisa sobre esta família complexa de compostos.

O domínio de investigação dos polioxometalatos é bastante ramificado, incluindo a síntese de novos materiais e estudo das suas propriedades físicas (propriedades ópticas incluindo óptica não linear, propriedades magnéticas), utilização em catálise ácida ou oxidativa, avaliação do potencial em medicina (ex: agentes anti-virais) ou ainda a concepção de novas arquitecturas moleculares com dimensões nanométricas. [5,10,11]

2. Características típicas

Nos polioxometalatos podem-se considerar duas famílias representativas, os isopolianíões ([M_xO_y]^{m-}) e os heteropolianíões ([X_zM_xO_y]ⁿ⁻). Os isopolianíões são aniões constituídos por dois tipos de elementos: o oxigénio e um elemento metálico M = Mo, W (ou os menos frequentes V, Nb e Ta). Este segundo elemento combina carga e raio iónico apropriados com orbitais δ vazias para a ligação π M-O. Nos heteropolianíões já aparece incorporado um outro elemento, o heteroátomo X, podendo haver um ou mais heteroátomos (conhecem-se mais de 70 heteroelementos

diferentes). O heteroátomo primário é aquele que é imprescindível para a manutenção da estrutura básica do heteropolianíão; este não pode ser removido ou substituído quimicamente, sem destruir o anião. O heteroátomo secundário pode por sua vez ser libertado do heteropolianíão deixando uma sub-unidade polioxoaniónica estável. [2,4] Por exemplo, no heteropolianíão α -[PW₁₁Co(H₂O)O₃₉]⁵⁻ o heteroátomo primário é o P (centro da estrutura) e o secundário é o Co (estando o ião Co^{II} ligado a [PW₁₁O₃₉]⁷⁻ e a uma molécula de H₂O adicional).

Uma questão pertinente prende-se com o facto dos compostos baseados em polioxometalatos apresentarem, tipicamente, estruturas organizadas em unidades discretas. Pensa-se que a forte polarização dos átomos de oxigénios terminais em relação ao interior do heteropolianíão (devido à ligação π), explica porque é que uma vez formado o heteropolianíão, o processo de polimerização não se estende com a formação de cadeias (extensas), mas termina aí, com a obtenção de unidades discretas. [6] Por outro lado, podem-se considerar duas grandes sub-classes estruturais para os polioxometalatos: uma exibida pelos aniões de Mo (VI) e W (VI) e outra

apresentada por certos polioxomolibdatos de valência mista (Mo (VI)/Mo (V)), conforme se verá no ponto 3.

Os polioxometalatos apresentam um conjunto de propriedades peculiar. A sua dimensão iónica é relativamente grande tendo-se já isolado e caracterizado estruturalmente polioxometalatos até dimensões de ~4 nm e as suas massas molares podem ir até ~40000 g/mol. [7,12] São robustos à degradação oxidativa e potenciais "armazenadores" de electrões, em virtude dos seus elementos constituintes fundamentais (Mo ou W) estarem, em geral, no seu estado de oxidação mais elevado. [2,4,6,11] Apresentam, geralmente, uma estabilidade térmica elevada. [4,13] A solubilidade dos sais de heteropolianíões é essencialmente determinada pelo contra-catião, uma vez que estes compostos possuem uma energia de rede baixa e a energia de solvatação do anião é igualmente baixa. [6] Assim, sais de K⁺, Na⁺, NH₄⁺ são solúveis em água; sais de tetra-n-butilamónio são solúveis nalguns solventes orgânicos polares, mas não em água. Sais com catiões surfactídeos são solúveis em solventes orgânicos apolares e os ácidos são geralmente solúveis em água e numa grande gama de solventes orgânicos. Esta característica

é importante, designadamente, para a realização de experiências de catálise em fase líquida.

3. O anião de Keggin e os seus derivados lacunares.

Polioxomolibdatos de valência mista

Entre os polioxometalatos mais estudados estão incluídos os aniões de Keggin. Este anião (que tomou o nome do autor que fez a sua caracterização estrutural) de fórmula geral $\alpha\text{-[XM}_{12}\text{O}_{40}]^{p-}$ (XM_{12}), $\text{M} = \text{Mo}^{\text{VI}}, \text{W}^{\text{VI}}$; $\text{X} = \text{P}^{\text{V}}, \text{As}^{\text{V}}, \text{Ge}^{\text{IV}}, \text{Si}^{\text{IV}}, \text{B}^{\text{III}}, \text{Fe}^{\text{III}}, \text{Co}^{\text{II}}, (\text{H})_2^{2+}$ (entre outros heteroátomos) apresenta uma simetria tetraédrica. Neste polioxometalato (figura 1c) o grupo central XO_4 encontra-se rodeado por doze octaedros MO_6 , que formam quatro grupos de três octaedros cada (M_3O_{13}). Observa-se a partilha de arestas de oxigénios (2) em cada grupo e de vértices de oxigénio (1) entre os vários grupos M_3O_{13} . [2,9] A partir do anião de Keggin (isómero α) podem-se hipoteticamente derivar os isómeros β , γ (figura 3 a,b), δ e ϵ obtidos por rotação de 60° de um grupo M_3O_{13} , relativamente ao isómero α , sendo que, no caso do isómero ϵ , os quatro grupos M_3O_{13} foram rodados. [2] Efectivamente, o isómero β já foi observado (e isolado) para PM_{12} e SiM_{12} , $\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$ [2,14] e o anião γ registado com SiW_{12} [15].

A partir do anião de Keggin (analogamente para os outros isómeros) podem-se ainda obter diversas estruturas lacunares por remoção de um ou mais octaedros. O anião $\alpha\text{-[XM}_{11}\text{O}_{39}]^{(p+4)-}$ (monolacunar) resulta da remoção dum grupo MO^{4+} (um metal M conjuntamente com o seu oxigénio terminal), originando uma lacuna com 5 átomos de oxigénio potencialmente coordenantes (figura 3c). Os polianiões $\alpha\text{-[XM}_9\text{O}_{34}]^{(p+6)-}$ (trilacunares) derivam da remoção de três octaedros (fragmento $\text{M}_3\text{O}_6^{6+}$) do anião de Keggin (figura 3 d,e). Estas espécies químicas (monolacunares e trilacunares) são potencialmente coordenantes e originam com-

plexos diversos, designadamente com catiões de metais de transição (entre outras espécies) (figura 1e). [2]

No caso dos polioxotungstatos a maior parte das estruturas conhecidas podem ser relacionadas com a do anião de Keggin (e seus isómeros) ou com fragmentos lacunares deste. Por exemplo, o anião de Dawson $[\text{P}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$ (figura 1d), pode ser estruturalmente visualizado como o resultado da condensação de duas sub-unidades $\alpha\text{-A-[PW}_9\text{O}_{34}]^{3-}$.

Para os polioxomolibdatos conhece-se uma maior diversidade estrutural, podendo estes exibir estruturas semelhantes às dos polioxotungstatos, assim como outras baseadas em unidades constituintes estruturalmente diferentes. É o caso dos aniões de valência mista, $\{\text{Mo}_{154}\}$ e $\{\text{Mo}_{176}\}$ (representação simplificada salientando apenas o número de átomos de Mo da fórmula). [7,16,17] Estes polianiões de Mo (VI) e Mo (V) apresentam uma forma geométrica semelhante a um anel e são constituídos pelos fragmentos $\{\text{Mo}_8\}$, $\{\text{Mo}_2\}$ e $\{\text{Mo}_1\}$ (figura 2a). O fragmento $\{\text{Mo}_8\}$ apresenta uma bipirâmide pentagonal central MoO_7 ou MoO_6NO à qual se encontram ligados cinco octaedros MoO_6 por partilha de arestas de oxigénios, existindo mais dois octaedros adicionais, ligados por vértices de oxigénio; o fragmento $\{\text{Mo}_2\}$ é constituído por dois octaedros partilhando um átomo de oxigénio, $\{\text{Mo}_2\text{VO}_5(\text{H}_2\text{O})_2\}$ e o fragmento $\{\text{Mo}_1\}$ corresponde a um octaedro MoO_6 . Nas estruturas resultantes, grupos $\{\text{Mo}_8\}$ do mesmo plano do anel ligam-se entre si por intermédio dos fragmentos $\{\text{Mo}_2\}$ e grupos $\{\text{Mo}_8\}$ acima e abaixo do plano equatorial do anel estão ligados por intermédio dos fragmentos $\{\text{Mo}_1\}$. De acordo com este esquema de construção geométrica os aniões referidos podem ser representados como $[\{\text{Mo}_8\}\{\text{Mo}_2\}\{\text{Mo}_1\}]_n$, com $n=14$ para $\{\text{Mo}_{154}\}$, e $n=16$ para $\{\text{Mo}_{176}\}$. Outro anião estruturalmente relacionado é o $\{\text{Mo}_{248}\}$. [18] Neste anião a cavidade do anel de $\{\text{Mo}_{176}\}$ aparece preenchida por dois fragmen-

tos adicionais $\{\text{Mo}_{12}^{\text{VI}}\text{Mo}_{24}^{\text{V}}\text{O}_{96}(\text{H}_2\text{O})_{24}\} \equiv \{\text{Mo}_{36}\}$, ligados a oxigénios terminais dos grupos $\{\text{Mo}_2\}$.

Um outro polioxomolibdato de estrutura invulgar é o anião $\{\text{Mo}_{132}\}$ (figura 2 b). [8] Este anião baseia-se no fragmento fundamental $\{(\text{Mo}^{\text{VI}})\text{Mo}_5^{\text{VI}}\text{O}_{21}(\text{H}_2\text{O})_6\} \equiv \{\text{Mo}_6\}$, que corresponde a uma bipirâmide pentagonal central MoO_7 ligada a cinco octaedros MoO_6 por partilha de arestas, formando um "pentágono". Os vários fragmentos $\{\text{Mo}_6\}$ ligam-se entre si por intermédio de pontes $\{\text{Mo}_2\text{VO}_4(\text{CH}_3\text{COO})\}$, originando um anião de forma aproximadamente esférica. A estrutura deste anião tem semelhança geométrica com a do fulereno C_{60} , apresentando, contudo, uma dimensão consideravelmente superior (diâmetro de cerca de 2.5 nm – nanocápsula).

Todos estes polioxomolibdatos referidos, $\{\text{Mo}_{154}\}$, $\{\text{Mo}_{176}\}$, $\{\text{Mo}_{248}\}$ e $\{\text{Mo}_{132}\}$ apresentam dimensões nanométricas e massas molares superiores a 20000 g/mol e estão (juntamente com outros polioxometalatos) entre as espécies inorgânicas discretas de maior tamanho, que se encontram estruturalmente caracterizadas.

4. Propriedades electrónicas

Os polioxometalatos são susceptíveis de receber electrões, em processos reversíveis ou irreversíveis. Os polioxometalatos baseados em octaedros de coordenação $\text{M}^{\text{VI}}\text{O}_6$ com apenas uma ligação terminal $\text{M}=\text{O}$ (tipo I), onde estão incluídos, por exemplo, os aniões de Keggin, apresentam em solução aquosa, voltamogramas cíclicos caracterizados por várias ondas de redução reversíveis de um ou dois electrões cada. A sua redução origina espécies de valência mista, tipicamente de cor azul escura (até um máximo de seis electrões adicionados). Em solução aquosa, observa-se a estabilização de espécies reduzidas por protonação e conhecem-se fenómenos de dismutação (equação I). [2,4] Estudos electroquímicos realizados em solventes



orgânicos para aniões do tipo Keggin evidenciam alterações significativas dos potenciais de redução, quando comparados com os correspondentes em solução aquosa. [19,20] Em contraste, polioxometalatos baseados em octaedros de coordenação M^VO_6 com duas ligações terminais *cis* $M=O$ (tipo II) (figura 1b) são reduzidos de uma forma irreversível ou são electroquimicamente inactivos. [2,4]

As espécies reduzidas de polioxometalatos do tipo I, vulgarmente conhecidas por "heteropolianiões azuis", apresentam um espectro óptico caracterizado pela presença de bandas de transferência de carga metal-metal, ($M^V \rightarrow M^{VI}$), de absorvidade molar elevada, na região do Vis/IV próximo. Realce-se que esta característica é a base para o uso de vários polioxometalatos em determinações analíticas por espectrofotometria (Si, P, Ge, As). Por outro lado, o Mo^V , W^V (ou o V^{IV}) apresentam sinais característicos no espectro de Ressonância Paramagnética Electrónica (RPE) podendo ser a sua presença estudada por essa técnica. Em geral, à temperatura ambiente existe uma rápida deslocalização electrónica (mais rápida que a escala de tempo do RPE) nas espécies reduzidas de um electrão, como consequência da transferência electrónica intra-molecular, em que o número e o tipo de centros metálicos envolvidos na troca depende da estrutura e composição do complexo; a temperatura suficientemente baixa (77 K ou inferior), o electrão desemparelhado fica "localizado" num dado centro metálico. A redução de dois ou quatro electrões origina espécies silenciosas no RPE, devido ao emparelhamento de spin electrónico. [2,4,6]

5. Síntese

Os polioxometalatos são preparados geralmente com base em reacções realizadas em solução aquosa ou em solvente

orgânico (ou em misturas de solventes). Grande parte das sínteses efectuadas em solução aquosa baseia-se numa acidificação controlada do meio reaccional (equações II e III). Espécies lacunares dos heteropolianiões de Keggin e Dawson, podem ser obtidas por adição de soluções alcalinas a soluções aquosas contendo esses aniões (equação IV). [2,21] A presença de agentes redutores é favorável à obtenção de espécies reduzidas e/ou novas estruturas de polioxometalatos. [11,12]

Por outro lado, a adição de solvente orgânico, pode permitir a preparação de polioxometalatos pouco estáveis em solução aquosa. Por exemplo, o anião β - $[PW_{12}O_{40}]^{3-}$ foi obtido com base numa reacção feita numa mistura de solventes água/acetoneitrilo (a partir de tungstato, hidrogenofosfato e ácido clorídrico), verificando-se em solução aquosa que o correspondente isómero β se transforma espontaneamente no isómero α . [14] Analogamente, o anião γ - $[SiW_{12}O_{40}]^{4-}$ foi preparado a partir de uma reacção realizada numa mistura água/etanol. [15]

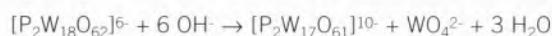
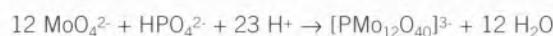
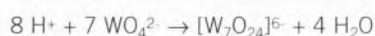
O isolamento dos polioxometalatos é feito, em geral, através da precipitação com sais de catiões de metais alcalinos (Li^+ , K^+ , Na^+ , Cs^+) ou sais de alquilamónio (ex: tetra-*n*-butilamónio). O uso de contra-catiões adequados ou combinações de diferentes contra-catiões pode ser determinante no isolamento de um determinado tipo de polioxometalato e na obtenção de cristais adequados para caracterização estrutural por difracção de raios X. É de realçar, ainda, que as sínteses de compostos com polioxometalatos podem ser dimensionadas para a obtenção de grandes quantidades de composto, utilizando reagentes comuns e relativamente baratos, validando assim o interesse para aplicações do foro industrial.

6. Aplicações em catálise. Outras aplicações

Uma das áreas de investigação onde os polioxometalatos apresentam mais potencial é na catálise, podendo ser utilizados quer como catalisadores ácidos ou oxidativos. A catálise ácida remonta aos anos 70, quando se descobriu que certos heteropolíácidos baseados no anião de Keggin, $H_n[XM_{12}O_{40}]$ ($X = P, Si$, $M = Mo, W$) eram ácidos de Brønsted mais fortes que o ácido sulfúrico, tendo a vantagem de não serem voláteis e de possuírem uma boa estabilidade térmica. Desde então, foram utilizados num grande número de transformações químicas, sendo de destacar o seu uso actual na indústria nos processos de hidratação do propeno (formação de álcool) e polimerização do tetra-hidrofurano. [22–24]

Os polioxometalatos revelam-se, igualmente, catalisadores eficientes em numerosas transformações oxidativas. Uma lista não exaustiva de oxidações com oxigénio molecular, usando os molibdovanadatos com a estrutura de Keggin, $[PMo_{12-x}V_xO_{40}]$ ($x=1-6$), inclui a oxidação de 2-metilnaftaleno a 2-metil-1,4-naftoquinona (vitamina K_3 , esquema 1-A), oxidação de 2,3,5-trimetilfenol a 2,3,5-trimetil-1,4-benzoquinona (precursor da vitamina E), oxidação de compostos de enxofre (poluentes), oxidação de acetileno a acetaldeído (oxidação de Wacker, um processo industrial), oxidação da metacroleína a ácido metacrílico (processo industrial) e deslignificação da pasta kraft (branqueamento da pasta celulósica). As oxidações com O_2 podem ser realizadas com os polioxometalatos dissolvidos em fase líquida ou imobilizados em matrizes de carvão activado, sílica, ou outros suportes (sistema heterogéneo). [22,25]

Os polioxometalatos têm sido, ainda, empregues como catalisadores oxidativos usando como oxidante o peróxido

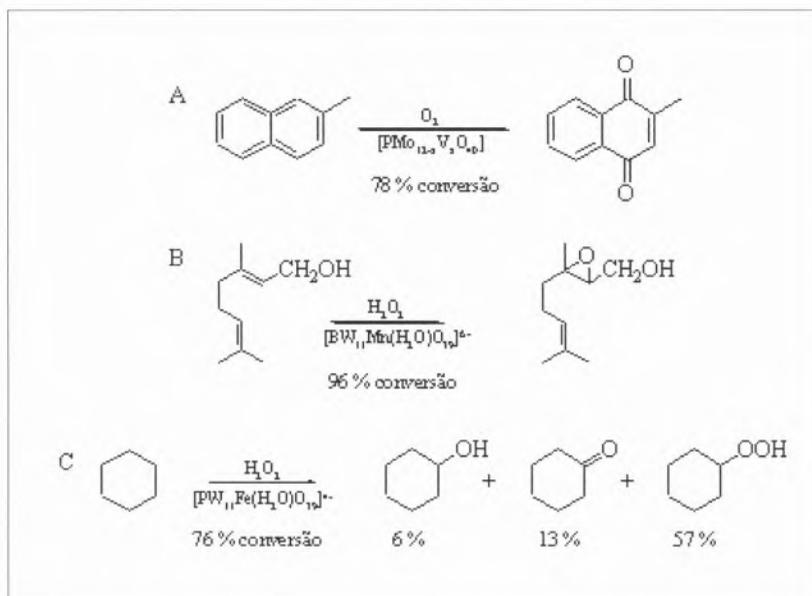


equação II

equação III

equação IV

esquema 1 Algumas oxidações de compostos orgânicos catalisadas por polioxometalatos. [22,27,28]



de hidrogénio, que a seguir ao oxigénio é o mais viável (barato e "amigo" do ambiente). Epoxidação de alcenos como o ciclo-octeno e ciclo-hexeno, de terpenos como o geraniol (esquema 1-B) ou oxidação de ciclo-alcenos (esquema 1-C) foram realizadas com sucesso, usando polioxometalatos substituídos por metais de transição. [25,26–28]. As reacções com H_2O_2 são normalmente realizadas em sistema monofásico (fase líquida) ou bifásico (duas fases líquidas imiscíveis). Alternativas a este procedimento incluem a imobilização dos polioxometalatos em suportes de sílica funcionalizada, o que apresenta vantagens quer pela possibilidade de recuperar facilmente o catalisador no final da reacção quer pela ausência desejada do solvente orgânico. [29] O uso de sistemas heterogêneos poderá ser um meio de expandir a aplicação dos polioxometalatos a uma escala mais alargada, nas reacções catalíticas com peróxido de hidrogénio. É de frisar que as múltiplas possibilidades que existem de fazer variar a estrutura do polioxometalato e em particular para um dado tipo de estrutura, a sua composição, estão, ainda, por ser exploradas no campo da catálise oxidativa.

Os polioxometalatos têm apresentado algum interesse no campo da medicina, designadamente como agentes anti-virais. Um grande número de resultados pode-se encontrar na literatura, regis-

tando a sua acção contra o HIV (vírus da imunodeficiência adquirida), RSV (vírus respiratório sincicial), vários tipos de vírus relacionados com a leucemia, herpes, entre outros, existindo evidência da sua acção não apenas *in vitro* mas também *in vivo*. Demonstrou-se ainda que os polioxometalatos são capazes de penetrar nas membranas celulares e localizar-se no interior das células, sendo a sua actividade anti-viral relacionada com a interacção que apresentam com enzimas virais ou proteínas de superfície virais (ex: glicoproteína 120 do HIV). Factores como a estrutura, composição química, carga iónica e tamanho do polioxometalato, para além das características do vírus são de considerar na sua acção anti-viral. [5,30]

Outras aplicações dos polioxometalatos, para além das já referidas na catálise e medicina, incluem o seu uso em química analítica (determinação de P, Si, As, proteínas), em revestimentos de superfícies metálicas resistentes à corrosão, para tratamento de soluções radioactivas, na preparação de eléctrodos selectivos, sensores de gás (ex: CO) ou células de combustível, utilização em pigmentos para tintas ou na obtenção de materiais com propriedades ópticas (fotocromismo, electrocromismo, óptica não linear). A título de curiosidade refira-se que o número de patentes relacionadas com polioxometalatos entre 1991

e 1996 foi sempre superior a 100 por ano, o que é, de alguma forma, ilustrativo das potencialidades deste tipo de compostos. [31–33]

7. Conclusões

Os polioxometalatos formam uma classe de aniões que apresenta um conjunto de propriedades topológicas e electrónicas invulgar. Em particular, certos polioxomolibdatos recentemente obtidos, como o $\{\text{Mo}_{132}\}$, dada a sua estabilidade em solução e propriedades estruturais, apresentam um interesse acrescido pela possibilidade de neles se desenvolverem interacções hóspede-hospedeiro (nanocápsula) um assunto de interesse potencial, ainda num estado embrionário. [34]

A utilização em áreas de impacto social como a medicina ou a ciência dos materiais abre portas para uma investigação continuada e de preferência interdisciplinar, que deve ser desenvolvida no futuro. À parte disso, a beleza estética de certas arquitecturas moleculares revela-se singular; citando uma frase de Muller, a propósito da descoberta do $\{\text{Mo}_{132}\}$:

"Of interest is certainly not only the production of mesoscopic (or nanostructured) and macroscopic objects with func-

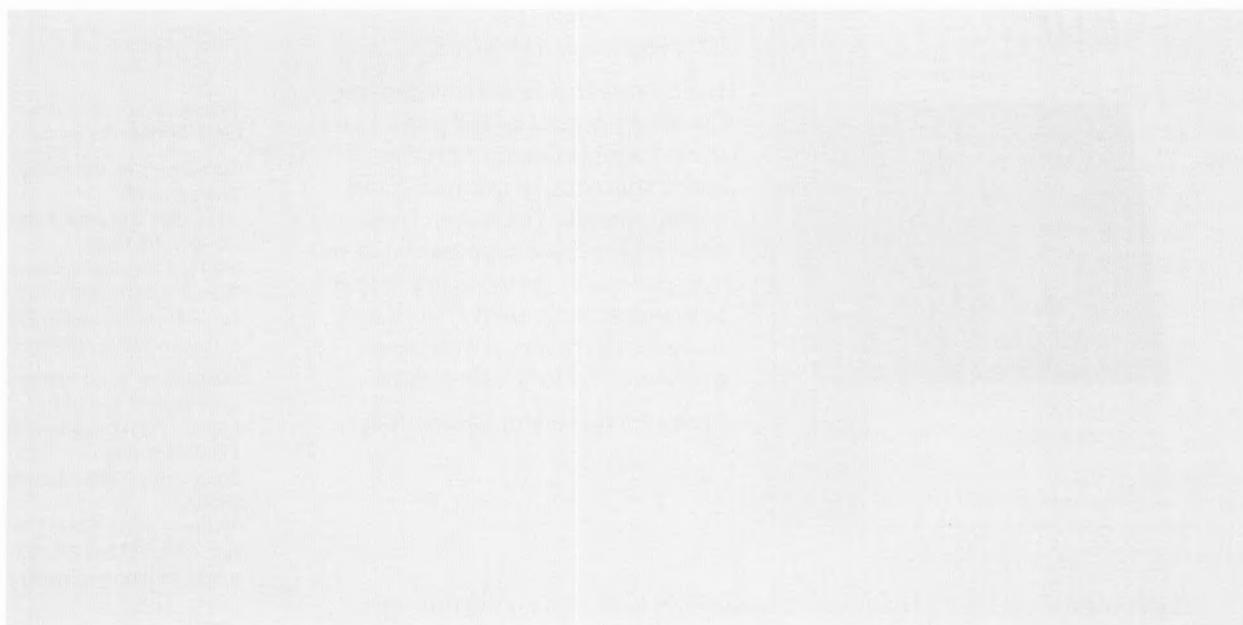
tional versatility, but also the aesthetic beauty of such assemblies" [8]

Agradecimentos

Agradece-se a cortesia dos Professores Achim Muller e Michael Pope.

Referências

- Evans, H. T. *Perspect. Struct. Chem.*, **1971**, 4, 1.
- Pope, M. T. *Heteropoly and Isopoly Oxometalates*, Springer Verlag, **1983**.
- Pope, M. T. no *Comprehensive Coordination Chemistry*, Wilkinson, G. (ed.) Pergamon Press, **1987**, vol. 3, p. 1023.
- Pope, M. T.; Muller, A. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1991**, 30, 34.
- Polyoxometalates: From Platonic Solids to Anti-retroviral Activity*, Pope, M. T.; Muller, A. (eds.), Kluwer Academic Publ., **1994**.
- Baker, L. C. W.; Glick, D. C. *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 3.
- Muller, A.; Krickemeyer, E.; Bogge, H.; Schmidtman, M.; Beugholt, C.; Kogerler, P.; Lu, C. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1998**, 37, 1220.
- Muller, A.; Krickemeyer, E.; Bogge, H.; Schmidtman, M.; Peters, F. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1998**, 37, 3360.
- Keggin, J. F. *Nature*, **1933**, 131, 908.
- Hill, C. L. *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 1.
- Muller, A. em *NATO ASI on Polyoxometalate Molecular Science*, Tenerife, **2001**.
- Muller, A.; Peters, F.; Pope, M. T.; Gatteschi, D. *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 239.
- Gamelas, J. A. F.; Couto, F. A.; Trovão, M. C.; Cavaleiro, A. M. V.; Cavaleiro, J. A. S.; Pedrosa de Jesus, J. D. *Thermochim. Acta*, **1999**, 326, 165.
- Himeno, S.; Takamoto, M.; Ueda, T. J. *Electroanal. Chem.*, **1999**, 465, 129.
- Tézé, A.; Canny, J.; Gurban, L.; Thouvenot, R.; Hervé, G. *Inorg. Chem.*, **1996**, 35, 1001.
- Muller, A.; Krickemeyer, E.; Meyer, J.; Bogge, H.; Peters, F.; Plass, W.; Diemann, E.; Dillinger, S.; Nonnenbruch, F. Randerath, M.; Menke, C. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1995**, 34, 2122.
- Muller, A.; Beugholt, C. *Nature*, **1996**, 383, 296.
- Muller, A.; Shah, S. Q.; Bogge, H.; Schmidtman, M. *Nature*, **1999**, 397, 48.
- Balula, M. S.; Gamelas, J. A. F.; Carapuçã, H. M.; Cavaleiro, A. M. V.; Schliindwein, W. *aceite para publicação em Eur. J. Inorg Chem.*
- Gamelas, J. A. F.; Balula, M. S.; Carapuçã, H. M.; Cavaleiro, A. M. V. *Electrochem. Commun.*, **2003**, 5, 378.
- Klemperer, W. *Inorg. Synth.*, **1990**, 27, 71.
- Kozhevnikov, I. *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 171.
- Mizuno, N.; Misono, M. *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 199.
- Misono, M.; *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **2001**, 1141.
- Neumann, R. *Prog. Inorg. Chem.*, **1998**, 47, 317.
- Hill, C. L.; Zhang, X. *Nature*, **1995**, 373, 324.
- Simões, M. M. Q.; Conceição, C. M. M.; Gamelas, J. A. F.; Domingues, P. M. D.; Cavaleiro, A. M. V.; Cavaleiro, J. A. S.; Ferrer-Correia, A. J. V.; Johnstone, R. A. W. J. *Mol. Catal. A*, **1999**, 144, 461.
- Santos, I. C. M.; Simões M. M. Q.; Pereira, M. M. M.; Martins, R. R. L.; Neves, M. G. P.; Cavaleiro, J. A. S.; Cavaleiro, A. M. V. J. *Mol. Catal. A*, **2003**, 195, 253.
- Neumann, R.; Miller, H. J. *Chem. Soc., Chem. Commun.*, **1995**, 2277.
- Rhule, J. T.; Hill, C. L.; Judd, D.; Schinazi, R. *Chem. Rev.* **1998**, 98, 327.
- Katsoulis, D. E. *Chem. Rev.* **1998**, 98, 359.
- Coronado, E.; Gómez-García, C. *Chem. Rev.* **1998**, 98, 273.
- Yamase, T. *Chem. Rev.* **1998**, 98, 307.
- Muller, A.; Samar, K.; Kogerler, P.; Bogge, H.; Schmidtman, M.; Trautwein, A.; Shunemann, V.; Krickemeyer, E.; Preetz, W. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **2000**, 39, 3414.



EurJIC

European Journal of
Inorganic Chemistry

Your Journal

- First Impact Factor: 2.222
- Rapid publication times especially for short communications
- Now supported by ten national chemical societies (Belgium, France, Germany, Greece, Hungary – together with the Hungarian Academy of Sciences, Italy, The Netherlands, Portugal, Spain)
- Authors' work exhibited on the cover
- Attractive personal member subscription rates available; see: www.EurJIC.com
- More color

European Journal of Inorganic Chemistry



Wiley-VCH
2002 12 issues
ISSN Print 1434-1948
ISSN Electronic 1099-0682

The *European Journal of Inorganic Chemistry* publishes full papers and short communications on the entire spectrum of inorganic and organometallic chemistry. These contributions are supplemented by microreviews – introducing readers to one specific area of an author's research by means of a detailed overview of one selected topic.

Senior Editor: Ivano Bertini (Italy)

FREE SAMPLE COPY

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

Order Your Copy now:

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

- Please send me a free sample print copy
- Please enter our/my 2002 subscription to:
European Journal of Inorganic Chemistry
2002, ISSN Print 1434-1948
2002, ISSN Electronic 1099-0682
at the institutional rate*:
- | | | |
|--|------------------------------------|------------------------------------|
| | print | electronic |
| <input type="checkbox"/> Europe | <input type="checkbox"/> € 1868 | <input type="checkbox"/> € 1868 |
| <input type="checkbox"/> Switzerland | <input type="checkbox"/> sFr 3258 | <input type="checkbox"/> sFr 3258 |
| <input type="checkbox"/> All other countries | <input type="checkbox"/> US\$ 2308 | <input type="checkbox"/> US\$ 2308 |
- * For a 5% premium, institutions can choose both print and electronic access.

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

- | | |
|--|-----------------------------------|
| | print |
| <input type="checkbox"/> Europe | <input type="checkbox"/> € 218 |
| <input type="checkbox"/> Switzerland | <input type="checkbox"/> sFr 458 |
| <input type="checkbox"/> All other countries | <input type="checkbox"/> US\$ 248 |

Prices include postage and handling charges.

Please tick: private business

Name

Address

City/Postcode

Country

Membership-No.

Date/Signature

Please return this order to your local bookseller or to:

Customers in Germany, Austria and Switzerland:

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

Customers in all other areas:

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

 **WILEY-VCH**

Sublimação Inversa, o que é isso?

ISABEL MORGADO LEAL^a, JOÃO PAULO LEAL^b

Introdução

É do conhecimento comum que a matéria existe em três estados físicos fundamentais (sólido, líquido e gasoso). Pode ainda considerar-se um outro estado da matéria, o plasma. No que se refere aos estados fundamentais a matéria pode passar de um deles a outro mediante alterações de temperatura, pressão e volume. Essas mudanças de estado físico têm designações próprias associadas a cada um dos processos em causa. Este assunto é de tal modo básico que parecem não existir dúvidas sobre o mesmo. As dúvidas começaram quando uma visita aos manuais actualmente em vigor para o 8.º ano de escolaridade [1–3] mostraram que o termo sublimação é utilizado para denominar quer a passagem de uma substância do estado sólido ao gasoso sem passar pelo estado líquido quer a operação inversa. O facto de utilizar a mesma designação para um processo e o seu inverso é desde logo confusa. Quando falamos em sublimação (figura 1), afinal a qual dos processos nos estamos a referir? Porque se teria optado por tal? Haverá alguma justificação?

O passo seguinte foi a consulta dos dicionários de língua portuguesa. O dicionário da Texto Editora refere apenas para sublimação “Fazer passar um corpo directamente do estado sólido ao gasoso” [4], mas já outros dicionários definem sublimação como “Passagem do estado sólido ao estado gasoso sem passar pelo estado líquido; mudança de

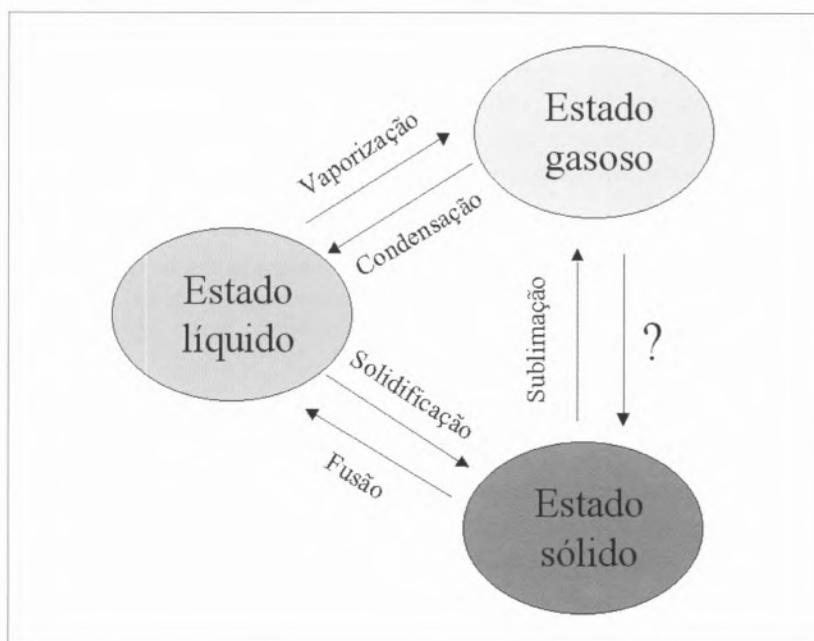


figura 1 Estados da matéria e conversão entre os mesmos.

estado inversa desta” [5–7]. Procurando mais, a única outra fonte que refere, neste caso de modo muito explícito, que o termo sublimação se aplica a ambas as transformações é a referência 8 editada pela Universidade Aberta.

Todas as outras fontes consultadas seguem um caminho distinto (as páginas da internet citadas são de colégios, universidades ou de organismos ligados aos ministérios da educação dos respectivos países). Um grupo dessas fontes associa o termo sublimação **apenas** à passagem do estado sólido ao gasoso, sem no entanto referir uma terminologia para a operação inversa, quer em língua

inglesa [9–14], quer em língua portuguesa [15–19]. Em língua francesa utiliza-se o termo sublimação para a passagem do estado sólido ao gasoso e o termo condensação (condensation) para a operação inversa [20–22]. Nos demais casos associa-se o termo sublimação à passagem do estado sólido ao gasoso, e o termo **deposição** à transformação inversa, em língua inglesa (deposition) [23–32], em língua espanhola (deposición) [33–35], e em língua portuguesa [36–38].

Consultados alguns professores do ensino secundário as opiniões não são unânimes. Uns seguem exactamente o que

^a DRE-LVT, Serviço da Qualidade, da Dir. Reg. de Lisboa e Vale do Tejo do Ministério da Economia.

^b Departamento de Química, Instituto Tecnológico e Nuclear, Departamento de Química e Bioquímica e Centro de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa.

vem nos manuais, outros acham que o mesmo termo para os dois processos é confuso, usando então sublimação para a passagem do estado sólido ao gasoso e sublimação inversa para a passagem do estado gasoso ao sólido. Há ainda quem ache que o processo inverso da sublimação se chama deposição, e assim ensine aos seus alunos.

Comentário final

Não faz qualquer sentido atribuir a uma transformação e à transformação inversa (qualquer que ela seja) a mesma designação. Para além disso, conclui-se que os termos para designar cada uma dessas transformações existem e têm sido usados desde há longo tempo. Lembrando que para faixas etárias mais baixas o ensino da ciência pode, e deve, ser simplificado, alerta-se para o facto de que uma tal simplificação nunca pode ser sinónimo de uma incorrecção. Pior que não ensinar, é ensinar mal. Os conceitos que são dados aos alunos no secundário, quando pela primeira vez contactam com os mesmos podem ser simples, mas devem ser cuidados de modo a não ensinar erros que podem dificultar a aprendizagem futura. Não seria descabido que sobre este assunto, e outros na área da Química, a Sociedade Portuguesa de Química se pronunciasse. Deste modo poder-se-iam evitar algumas incorrecções existentes nos manuais escolares e contribuir para um melhor ensino da Ciência em geral, e da Química em particular.

Bibliografia

- Mercês Ramos, Fátima Santos, Francisca Viegas, "Da magia à ciência química – 8.º ano", Escolar Editora, p. 29.
- M. Margarida R. D. Rodrigues, Fernando Morão Lopes Dias, "Química na nossa vida – 8.º ano", Porto Editora, p. 13–14.
- Maria Armada Cunha Martins, "Nova Química, Ciências Físico-Químicas – 8.º ano", Areal Editores, p. 19.
- Dicionário Universal da Língua Portuguesa, Texto Editora, 8.ª edição, Lisboa, 2002.
- Dicionário Língua Portuguesa, Porto Editora, www.portoeditora.pt/
- Grande Dicionário da Língua Portuguesa, Círculo de Leitores, 1997.
- Dicionário de Ciência, Publicações D. Quixote/Círculo de Leitores, Lisboa, 1991.
- Carla Padrel Oliveira, Maria Teresa F. Paiva Sousa, "Introdução à Química", Universidade Aberta, Lisboa, 1999, p. 49.
- IUPAC Compendium of Chemical Terminology, www.chemsoc.org/cgi-shell/empower.exe
- "McGraw Hill Encyclopedia of Chemistry", Sybil P. Parker Ed., McGraw Hill Book Company, N.Y., 1983, p. 1003.
- C. H. Snyder, "The extraordinary Chemistry of Ordinary Things", 2nd ed., John Wiley & Sons, N. Y., 1995, p. 293.
- L. Jones, P. Atkins, "Chemistry- Molecules, Matter and Change", 4th ed., W. H. Freeman & Company, N. Y., 2000, p. 239.
- J. C. Kotz, P. M. Treichel, Jr., "Chemistry & Chemical Reactivity", 5th ed., Thomson Brooks/Cole Eds., 2003, p. 545.
- C. E. Housecroft, E. C. Constable, "Chemistry", 2nd ed., Prentice Hall-Pearson Education, London, 2002, p. 11.
- J. B. Russell, "Química Geral", 2.ª ed., Vol.1, Makron Books, São Paulo-Brasil, 1992.
- A. J. L. O. Pombeiro, "Técnicas e Operações Unitárias em Química Laboratorial", Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1983, p. 12.
- G. C. Pimentel, "Química – Uma Ciência Experimental", 3.ª ed., Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1978, p. 258.
- B. C. Mahan, "Química – Um Curso Universitário", 2.ª ed., Edgar Blücher Ltda Eds., S. Paulo – Brasil, 1972, p. 101.
- D. M. Himmelblau, Engenharia Química – Princípios e Cálculos", 4.ª ed., Prentice Hall Brasil, Rio de Janeiro, 1984, p. 199.
- Université de LeMans, <http://www.univ-lemans.fr/enseignements/chimie/O1/deug/se m2/pdf/thermo-1.pdf>.
- Université de Fribourg, http://www-chem.unifr.ch/avz/Einfuehrung_in_die_Chemie_fr.pdf.
- Centre Régional de Documentation Pédagogique des Pays de La Loire, <http://www.crdp-nantes.cndp.fr/crsm/telechargement/colonne-separation.pdf>.
- Wayne State College – Nebraska, USA, General Chemistry I, http://academic.wsc.edu/mathsci/karr_p/gchem1/states_of_matter/Gc_chap11.htm.
- Rice University, Texas, USA, <http://chemed.rice.edu/Chem122/bboard/view-post.cfm?Post=1028>.
- Southwest Baptist University, Missouri, USA, <http://falcon.sbniv.edu/~ggray.wh.bol/CHE1104/pcp2outl.html>.
- University of St. Thomas, Minnesota, USA, http://chem.stthomas.edu/pages/gen-chem/data/ch10/ch10_04.htm.
- Florida Community College at Jacksonville, USA, <http://web.fccj.edu/~ksanchez/1025/syllabi/objectives.pdf>.
- Manitoba Advanced Education and Training, <http://www.edu.gov.mb.ca/ks4/cur/science/ch30s/docs/over2.html>.
- Department of Chemistry, National Sun Yat-sen University, Taiwan, http://www2.nsysu.edu.tw/sysu-chem/faculty/ino/lc_liang/2001S_gen_chem_12301/11_States_of_Matter.pdf
- P. Atkins, "The Elements of Physical Chemistry", 3rd ed., Oxford University Press, 2001, p. 60.
- T. R. Dickson, "Introduction to Chemistry", 8th ed., John Wiley & Sons, N. Y., 2000, p. 344.
- D. W. Oxtoby, W. A. Freeman, T. F. Block, "Chemistry – Science of Change", 4th ed., Thomson Brooks/Cole Eds., Pacific Grove, 2003, p. 253.
- Sítio Oficial, Prova de Aptidão Académica (Acesso a Faculdade), Chile, http://www.paa.cl/html/pdf_datos/quimica.pdf.
- Centro Nacional de Información y Comunicación Educativa, Ministerio de Educación Cultura e Deporte, España, <http://platea.pntic.mec.es/~jdelucas/guiade-quimica.htm>.
- Página electrónica del Programa Nacional para la Actualización Permanente de Maestros de Educación Básica en Servicio, México, <http://pronap.ilce.edu.mx/examenes/Recomen/Actividades/c06unaposib2.htm>, nesta página refere-se que alguns professores usam "desublimación" em vez do indicado "deposición".
- Faculdade de Farmácia do Porto – Química Geral e Inorgânica, Prof. Dr. João Luís Santos, <http://qf0.ff.up.pt/qg/QGI-aula-12.pdf>
- R. Chang, "Química", 5.ª ed., McGraw Hill Book Company, Lisboa, 1994, p. 510.
- D. Reger, S. Goode, E. Mercer, "Química : Princípios e Aplicações", Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1997, p. 472.

Memória familiar e geográfica do químico Ferreira da Silva

EDUARDO TOMÁS ALVES*

1 – Explicação

Amabilidade grande, a do prof. Mário Berberan e Santos, Secretário-Geral da SPQ. A de me pedir a mim, um dos muitos descendentes do químico Ferreira da Silva (1853–1923, de quem em Julho deste ano se comemoram os 150 anos do nascimento) um artigo sobre o enquadramento familiar e geográfico deste patriarca da Química portuguesa.

2 – Dificuldades

Por um lado a minha qualidade de ex-advogado e de jornalista colaborador do Diário do Minho (no passado, também do Jornal de Notícias, do Porto) facilitam-me a expressão e o alinhamento de factos e ideias. Porém, quem quer que fale dos seus antepassados tem tendência a enaltecê-los. Mas quando o antepassado é Ferreira da Silva, um modelo de nós todos, será impossível dizer mal. Por isso peço indulgência se alguma vez pisar o traço da imodéstia. De qualquer forma sei que vós, os cientistas, os químicos, os físicos, os farmacêuticos, não levareis a mal. Até porque Ferreira da Silva foi um grande homem apenas por ter sido um grande químico (exactamente como vós outros) e não por ter sido um "Ferreira da Silva" (exactamente como eu). E a vós todos dedico este frágil opúsculo. A vós, os cultores da ciência de "Quem", nada menos do que o nome do Antigo Egipto, onde fluía o poético Aur, que hoje se chama Nilo...

3 – As biografias

Este artigo não é uma biografia. As biografias e "curricula" daquele Mestre têm

sido escritos por especialistas e uma das mais antigas será a do prof. ALBERTO DE AGUIAR. Penso até que o Boletim da SPQ publicará em 2003 uma delas, a propósito das comemorações. Este meu trabalho é apenas um enquadramento da pessoa de Ferreira da Silva na sua própria família e geografia pessoal. E inclui alguns "fait-divers" provavelmente mais relacionados com os seus parentes do que com ele próprio. Porque infelizmente já não se encontra vivo qualquer filho ou neto que com ele tenha convivido. O último, a sua filha Adozinda (n. 1903) faleceu no início dos anos 90.

4 – Breve História de Cucujães, onde nasceu

A vila de Cucujães, (ou Couto de Cucujães) é muito antiga e situa-se no norte do distrito de Aveiro (lá onde os últimos contrafortes boscosos das serras da Beira Alta escorregam lentamente para o plácida Ria e vigiam o pouco distante Atlântico. O povoamento histórico mais antigo da região é celtibero (concretamente a tribo dos Túrdulos, que curiosamente tinha ligações ao Baixo Alentejo, onde viveu outro seu ramo). O principal burgo dos Túrdulos era Lancóbriga (hoje Fiães da Feira, 7 kms a norte). Estes lusitanos deram muito trabalho aos romanos, que conquistaram e povoaram a área no séc. II a.C. e seguintes. A zona de Cucujães, tal como Lancóbriga, ficava situada na via militar romana que ligava Lisboa e Santarém a Coimbra, ao Porto e a Braga. E daqui se deduzirá a mistura "racial" adveniente. Depois, com as invasões germânicas, Cucujães foi incluída no reino suevo,

cujá capital era Braga (e que durou até 585 d.C.). Os suevos deram lugar aos poderosos godos, que parecem ter deixado uma marca toponímica importante na zona de Cucujães – S. João da Madeira e que é o monte de Castro-Recarei, nome que é usualmente interpretado como o da elevação onde se situou um forte construído pelo rei visigodo Rekaredo. Com a conquista muçulmana (711–715) vieram povoadores árabes e sobretudo mouriscos. E tal como Rekaredo, também o célebre conquistador iemenita Al-Mansur ou "o vitorioso" (que destruiu Coimbra em 987 e Compostela em 997) deixou ficar o nome ligado à região, no caso à vizinha freguesia de Mansores (Arouca) e à aldeia de Almanzor (Castelo de Paiva). Quando em 1086 o povoado primitivo de Cucujães (agora pertencente à Terra de Santa Maria) teve foral e couto, quem os deu foi ainda o rei de Leão, D. Afonso VI, avô de D. Afonso Henriques. Mas foi já no nosso 1.º reinado que se fundou o mosteiro de Cucujães, que haveria de durar até 1834 (e depois, de 1874 a 1910) mantendo-se a congregação até 1953 e sendo agora o Colégio das Missões. O nome de Cucujães, esse parece derivar do facto de ser terra onde cantavam muitos cucos (hoje raros) e a freguesia tem pertencido ao concelho de Oliveira de Azeméis, distrito de Aveiro.

5 – O químico que nasceu num convento

Ferreira da Silva nasceu curiosamente nesse convento de Cucujães, pois o seu pai era procurador das propriedades do mesmo, "nacionalizadas" pala reforma

* Bisneto do Prof. Ferreira da Silva, jornalista no "Diário do Minho"



figura 1 visconde de S. Tiago de Riba-Ul na adolescência;



figura 2 químico Ferreira da Silva aos 23 anos (26/05/1877);



figura 3 o sogro visconde (em cima, à direita), com duas filhas (Beatriz, sentada à direita e Idalina, a futura esposa do químico, sentada à esq.), e alguns amigos no Rio de Janeiro, 09/03/1880;

de Mouzinho da Silveira (1836). O 2.º comprador da quinta do convento foi o capitalista luso-brasileiro Joaquim António F. da Silva, tio paterno do químico, homem que dividiu a sua vida entre o Porto e o Rio de Janeiro. A quinta pertenceu pois à família entre 1850 e 1868. Os restos mortais do ilustre químico repousam, aliás, no cemitério adjacente ao seu local de nascimento. "Mistérios" da Química Orgânica...

O lugar da sua morte foi contudo a casa do Lameiro, em Figueiredo, na vizinha Santiago de Riba-Ul. E entre as muitas assinaturas de condolências, a de Salazar, então um desconhecido docente católico da Universidade de Coimbra. Registe-se ainda um telegrama de D. Manuel II, então no exílio.

6 – Casado com uma prima brasileira

Ainda não completara 27 anos e Ferreira da Silva já era, desde 20 de Maio de 1880, lente da Academia Politécnica do Porto, com regência de Química. Entre Agosto e Outubro de 1880, nesse ano de consagração, foi casar ao Rio de Janeiro com uma prima, Idalina de Sousa Godinho, filha do recém-criado Visconde de Santiago de Riba-Ul, José Joaquim Godinho (1836–1885).

7 – O sogro visconde

Este seu sogro e primo era um grande comerciante e filantropo luso-brasileiro, ligado à fundação ou gestão de instituições cariocas tão notórias como a Beneficência Portuguesa, o Banco Rural e Hipotecário, o Liceu Português e o célebre Gabinete Português de Leitura, do qual era director interino no ano do seu prematuro falecimento, aos 48 anos de idade. Foi o rei D. Luis I que fez visconde este natural de Santiago de Riba-Ul, freguesia vizinha de Cucujães.

O casamento entre primos era relativamente vulgar no séc. XIX. A mãe do visconde, Ana Maria Joaquina, era irmã do pai de Ferreira da Silva, o acima referido (e homónimo) procurador dos bens do convento de Cucujães, que viveu entre 1806 e 1869. E ambos eram irmãos do citado luso-brasileiro Joaquim António Ferreira da Silva (n. 1804) que comprou o convento de Cucujães (cf. N.º 5).

8 – Séculos atrás

Segundo as investigações, ainda incompletas, do genealogista e antiquário dr. MAURÍCIO ANTONINO FERNANDES, estes Silvas (que no início do séc. XVII já eram donos de terras na região de Cucujães e Santiago) viriam de Avanca, sendo pa-

rentes remotos do prof. Egas Moniz. Ambas as famílias descenderiam dos Gomes da Silva, de S. Marcos, Coimbra.

9 – A violenta memória de Napoleão

Um dos mais vivos episódios históricos que perduram ainda na memória colectiva local da região de S. João da Madeira – Cucujães – Oliveira de Azeméis é o massacre de 300 civis inocentes que se tinham refugiado na igreja de Arrifana, tentando evitar a represália das tropas de Soult, em 1809, durante a 2.ª invasão francesa. Essa represália fora originada pelo assassinato de dois oficiais franceses na vizinha Carcavelos (na ponte "dos cavaleiros"), por obra dos guerrilheiros locais, comandados por José Soares Barbosa da Cunha. Uma das vítimas fora o tenente-coronel Lameth, sobrinho do próprio Soult, que levava despachos para o gen. Franceschi, estacionado em Oliveira de Azeméis. Os comandantes do massacre da igreja de Arrifana foram os coronéis Zamiers e Olivete.

10 – Um (bis)avô autarca

Margarida Emília Ferreira (1828–1914), a mãe do químico, era filha ou neta (e desculpem a minha incerteza neste ponto) de Manuel Ferreira, por vários anos presidente do município de Cucu-



figura 4 Ferreira da Silva com as suas oito filhas;



figura 5 a esposa do químico Ferreira da Silva com os quatro filhos do casal (da esq. para a dir., José, Alberto, António e Alfredo);

jães. Em fins de 1834, com a despromoção do concelho a simples freguesia, foi Manuel Ferreira também o seu 1.º presidente da junta. E ainda regedor, entre 1841 e 1844.

11 – O actor Ferreira da Silva

O actor (Alfredo) Ferreira da Silva (1859–1923) que tem em Lisboa uma

rua com o seu nome no Bairro dos Actores (junto à Av. Almirante Reis e à Alameda Afonso Henriques) e que foi casado com a não menos famosa actriz Virgínia (n. 1850) era parente do químico Ferreira da Silva. É que uma tia do actor (irmã do pai) era casada com um tio paterno do cientista, no caso Manuel

José da Silva (n. 13–2–1802 em Santiago de Riba-Ul, Oliveira de Azeméis).

O actor deixou descendência em Lisboa através dos vários netos que lhe deu sua filha Maria Ema Campos. Por outro lado, o actor era também primo do escultor Thomaz Costa (1861–1932), autor das estátuas do marquês Saldanha (Lisboa),



figura 6 casa da Manta, em Cucujães (Oliveira de Azeméis), dos antepassados maternos de Ferreira da Silva;

infante D. Henrique (Porto) e António Nobre (Coimbra).

12 – O parentesco com o matemático Ruy Luís Gomes

O antigo candidato à presidência da República (em 1958) e um dos maiores matemáticos portugueses, Ruy Luís Gomes (1905–84) era parente consanguíneo do químico Ferreira da Silva. É que o químico era 2.º primo do pai deste célebre matemático (Professor nas universidades do Porto, Recife e Mar del Plata). Este pai de Ruy Luís Gomes foi o não menos célebre António Luís Gomes (1863–1961) ministro da Justiça do 1.º Governo Provisório da República Portuguesa (1910), reitor da Universidade de Coimbra e embaixador no Brasil. Os Ferreira da Silva e os Luís Gomes têm bisavós comuns em Santiago de Riba-Ul (Oliveira de Azeméis) na chamada Casa do Salgueiro e na pessoa do casal Ana (n. 1736) e Manuel José da Silva (n. 1741), que por acaso são antepassados de mim próprio por quatro lados diferentes...

Um irmão de Ruy Luís Gomes foi o dr. António Luís Gomes (n. 1898), administrador dos bens da casa de Bragança, director da Fazenda Pública entre 1933 e 40 e governador do Banco de Portugal, salvo erro nos anos 60.

13 – Com Brito Camacho, o Padre Américo e outros

Ferreira da Silva, apesar de todo o saber adquirido (ou por via dele mesmo...) manteve-se ao longo da vida católico e monárquico, nunca renegando o regime que o cumulava de honrarias (desde o Pariato ao Conselho de Sua Majestade ou à Comenda de Nossa Senhora da Conceição).

Entre os muitos alunos de que foi professor conta-se o notável político republicano conservador Brito Camacho (1862–1934), chefe histórico da "3.ª força", o partido Unionista. Natural de Aljustrel, militar, médico, escritor e jornalista, Brito Camacho foi ministro do Fomento no 1.º governo republicano e governador de Moçambique em 1921–22. Nessa qualidade visitou Brito Camacho as minas de carvão de Tete, das quais era à época, jovem director o meu avô António (engenheiro militar e filho mais velho do químico). Este encontro inesperado narra-o Brito Camacho no seu livro "Terra de Lendas" (página 242 da 1.ª edição). E recorda a propósito, como o químico Ferreira da Silva o salvara de um imerecido chumbo num exame da Academia Polytechnica do Porto. Gentileza que Brito Camacho retribuiu quando o meu bisavô Ferreira da Silva o visitou, agora ministro, em Lisboa (por 1911) para lhe falar de um qualquer outro assunto (ibid., "Terra de Lendas").

Com o Padre Américo (1887–1956) há a história de, num certo sarau de caridade ocorrido no Porto, o benemérito e temperamental sacerdote ter recusado a oferta deste meu citado avô militar "porque ele e o pai (químico) e a família já haviam dado de sobra".

Ferreira da Silva foi também bastante amigo do famoso missionário e bispo do Porto, D. António Barroso (1854–1923), homem que, tal como o Padre Américo, também deixou rasto de santidade entre o povo nortenho. E quando a mãe de Ferreira da Silva morreu (Fevereiro de 1914) foi na terra natal do bispo (Remelhe, em Barcelos) mandada celebrar uma missa; e o facto vem noticiado, com fotografia, na Ilustração Católica, importante revista da época.

Com Bento Carqueja, largos anos director e proprietário do O Comércio do Porto, a amizade e protecção dispensada pelo químico eram notórias, inclusive no próprio meio académico. Diziam as "más línguas" (em sentido próprio, provavelmente...) que tinha sido a amizade com Ferreira da Silva que fizera de Carqueja professor universitário.

14 – Teve 14 filhos, dos quais 5 deixaram vasta descendência

Assim foi, como era costume naqueles tempos. Dois desses filhos morreram na infância. Os restantes, foram 8 raparigas e 4 rapazes. Entre a filha mais velha, Alexandrina (nascida no Rio de Janeiro



figura 7 Margarida Emília Ferreira da Silva, mãe do químico, falecida em 1914 aos 86 anos de idade;

em 1883) e a mais nova, Margarida (nascida no Porto em 1909) havia mais de 26 anos de diferença. As outras filhas foram Alzira, Idalina (1889–1973, professora de música do Conservatório do Porto), Alice (casada com um professor francês, Mathieu Valadier, 1883–1957), Adelina, Adozinda, Antónia (casada com o médico português José Pereira Fernandes e mãe do prof. José António F. S. Fernandes, da Faculdade de Medicina da Universidade do Porto) e ainda Margarida (professora liceal de Letras que leccionou na antiga Lourenço Marques onde teve Otelo como aluno; e que foi casada com um seu colega de Viseu, o dr. António Pais da Cunha Jardim, pais do engenheiro António Jardim, outrora investigador no campo da energia atómica e depois ligado ao porto de Sines e à câmara de Setúbal).

15 – António, o filho mais velho, com Salazar e Gomes da Costa

Aqui, estou a falar do meu avô paterno, António Joaquim Ferreira da Silva Júnior (1887–1947) tenente-coronel de engenharia, o tal que vem referido acima, no n.º 12, e que Brito Camacho encontrou nas minas de Tete. Foi engenheiro-militar pela Escola do Exército e tinha também os cursos de Engenharia Civil, de Minas e de Electricidade. Foi o 2.º aluno do curso, atrás apenas do político Cunha Leal (1888–1970) que lhe era superior em esgrima e equitação. Fez, como

jovem capitão, a Guerra de 1914–18 na Flandres, no quartel general do irascível general Gomes da Costa (1863–1931) mais tarde presidente da República (logo depois do movimento do 28 de Maio de 1926, em que este mesmo meu avô também participou). Uma vez, nas trincheiras, o general perdeu a calma porque nenhum telefone funcionava. Logo chamou o meu avô, que rapidamente solucionou a "falha técnica", por acaso imputável ao próprio general... O Capitão António Ferreira da Silva esteve aliás na retaguarda da célebre batalha de La Lys (1918) como radio-telegrafista.

Nos anos 20 encontramos-lo na prospecção mineira da Zambézia e Tete. Volta então ao Porto onde é comandante do Batalhão de Telegrafistas. Nos anos 30 é membro do governo de Macau (director das Obras Públicas e Encarregado do Governo). Já major, foi director das Obras Militares da II Região Militar (Coimbra) e depois, comandante do Batalhão de Pontoneiros, em Tancos.

Quando nos anos 40 Salazar visitou o castelo de Almourol e aí jantou, foi ele que organizou o pontão com barcaças que permitia o acesso à ilha. Há até desta visita, uma anedota verídica, demonstrativa dos traços de carácter que este meu avô herdara de seu pai, o químico Ferreira da Silva. Salazar interrogou, sucessivamente e por ordem hierárquica, as altas patentes militares presentes acerca do funcionamento de

um grande frigorífico a petróleo que se encontrava nas imediações. E sucessivamente os generais iam dando explicações vagas e fluidas, nenhum deles confessando a sua ignorância. "E então o Sr. Major Ferreira da Silva, será que me poderá explicar melhor este funcionamento?" perguntou Salazar. Logo o meu avô se levantou da mesa e batendo continência retorquiu ironica, científica e teatralmente: "Senhor Presidente do Conselho, eu também não sei!". Salazar não levou a mal...

O seu último cargo foi, durante a 2.ª Guerra Mundial, o de comandante da Engenharia do Exército, nos Açores.

Casara aos 37 anos com Maria Luísa, uma sua parente, sobrinha-neta do pai do actor Ferreira da Silva. O único filho do casal foi meu pai, António C. A. Ferreira da Silva (1926–84), largos anos assistente e professor de Matemática na Universidade do Porto e desde 1977 na de Aveiro.

16 – José, o 2.º filho de Ferreira da Silva

Este José (1895–1953) tinha também vários cursos e altas classificações. Licenciado em Físico-Químicas e depois em Engenharia Civil, chegou a dar aulas nesta Faculdade no Porto. Concluiria ainda os estudos, na Escola do Exército, para a arma de Infantaria. Esteve em França na 1.ª Grande Guerra, donde regressou com a saúde algo debilitada, o

que não o impediu de ser toda a vida um trabalhador incansável. Engenheiro e professor (também no liceu), logo se ligou à indústria cerâmica, chegando a director da Empresa Cerâmica do Fojo (no norte) e mais tarde director da Fábrica de Louça de Sacavém.

Foi, além disso, presidente do Grémio dos Industriais de Cerâmica e procurador à Câmara Corporativa, além de membro do Conselho Superior dos Transportes Terrestres e do Fundo Especial dos Caminhos de Ferro. Foi casado com Maria Emília Saraiva de Aguiar, uma senhora de origem vila-realense, parente do actual chefe do governo, Durão Barroso, pelo lado dos Saraivas.

Dos cinco filhos do engenheiro José, um foi o arquitecto José Guilherme Ferreira da Silva (1929–95), que concebeu o aldeamento de Vale de Lobo, no Algarve.

17 – Alberto, o 3.º filho; a ordem de Cristo e Nemésio

Este Alberto (1898–1978) foi engenheiro agrónomo aos 21 anos. Logo professor da Escola Nacional de Agricultura, em Coimbra, da qual seria por vários anos director. Sócio do Instituto de Coimbra, foi por dois anos Governador Civil do mesmo distrito de Coimbra. Em 1942 foi para Angola instalar a Escola Agro-Pecuária da Huíla, em Tchivinguiro. Nesse distrito da Huíla foi também Encarregado do Governo. Regressou a Lisboa para trabalhar na Direcção Geral do Fomento (Min. do Ultramar). Foi então eleito para o Bureau International des Soles, o que o levou a viver quase dois anos em Paris. Terminou a carreira como director-adjunto do Instituto do Vinho do Porto, até se reformar em 1968.

Foi condecorado com a comenda da Ordem de Cristo portuguesa e com a da Ordem do Leão (belga), pelos seus trabalhos em África. Casou com Maria Luísa de Canaes e Mariz, dona que foi da quinta da Bencanta, em Coimbra. Esta senhora é mencionada na biografia de Salazar (de FRANCO NOGUEIRA, vol. I, páginas 100–101) como uma jovem pianista que animou saraus que o estudante Salazar frequentava, nomeadamente o de 2–2–1913. Consta até que Salazar chegou a andar pela Bencanta,

mas mais "curioso" acerca duma irmã desta Maria Luísa, que dela própria...

Uma das filhas do engenheiro Alberto Ferreira da Silva (também chamada Maria Luísa) casou com o dr. Jorge Nemésio, antigo cônsul de Portugal em Tours e Barcelona, filho que foi do escritor Vitorino Nemésio. Outro filho do eng.º Alberto foi o engenheiro-silvicultor Luís Ferreira da Silva (n. 1926), o qual, depois de trabalhar para o governo português quase uma década, na Zambézia, fez carreira como funcionário da ONU (FAO) sucessivamente no Panamá, Colômbia e Nicarágua. Uma filha sua, também engenheira agrónoma, está casada em Santarém com um colega, Vasco Sá Nogueira, um 5.º neto do marquês de Sá da Bandeira, tendo 3 filhos. Por este casamento tornou-se também afim do prof. Hermano Saraiva, que é casado com uma senhora Sá Nogueira.

18 – A "Legião de Honra" do 4.º filho, Alfredo, cunhado de Fernando Pessa

Com os olhos azuis, o nariz grosso como o pai e aspecto jovial, o comandante Alfredo Ferreira da Silva (1901–73) era o mais novo e seguramente o mais extrovertido dos quatro irmãos. Ainda nos preparatórios da Escola Naval, participou no movimento da chamada Monarquia do Norte, desse herói de África que foi Paiva Couceiro (1919). Parece que regressou a pé até ao Porto desde o norte de Trás-os-Montes, muito bem acolhido pelos sacerdotes e populares de várias aldeias do Marão. Tornou-se oficial de Marinha Piloto-aviador, começando pelas bases de S. Jacinto (Aveiro) e Bom Sucesso (Lisboa). Chegou durante alguns anos a ser director da Aeronáutica Naval. Ainda antes da 2.ª Guerra Mundial fizera, em aviões primitivos, muitos voos para a Madeira e Açores. Durante esse mesmo conflito, comandou a canhoneira Diu na fiscalização da costa portuguesa; e outros navios de guerra com base na Madeira, Cabo Verde e Guiné, salvando inúmeros naufragos, vítimas das hostilidades. O seu último comando foi o navio Afonso de Albuquerque na antiga Índia Portuguesa, reformando-se em 1959 como capitão de mar-e-guerra.

Como aviador militar caiu duas vezes (em Angeja e no Tejo); participou também no Golfo de Biscaia nas buscas do avião de Ramón Franco (o irmão do "caudilho"). E viajou várias vezes ao estrangeiro em comissões de serviço para a compra de material aeronáutico.

Foi condecorado pela França (tal como o químico seu pai) com a Legião de Honra; pela Inglaterra, com a medalha de Victória; e pela Espanha e Brasil, com as respectivas comendas de Mérito Naval.

Teve um casamento longo e feliz com D. Palmira Pessa, a única irmã do conhecido locutor Fernando Pessa. Sobre a competência, honestidade e capacidades do Comandante Alfredo Ferreira da Silva, poderá indagar-se junto do almirante Fuzeta da Ponte, que o conheceu bem de perto.

19 – Uma rua em Lisboa?

António Joaquim Ferreira da Silva, patriarca da Química lusa, é homenageado em várias localidades que deram o seu nome a ruas, ou lhe erigiram bustos.

Nomeadamente no Porto, onde há uma rua no centro da cidade com o seu nome; além de um baixo-relevo na parede exterior do Instituto de Medicina Legal (em frente ao Hospital de St. António) e um busto no interior da Faculdade de Ciências. No lugar em que nasceu, Cucujães, há outro busto, numa praça.

Cairia mal que, nos 150 anos do seu nascimento, seja em Lisboa dado o nome do Químico Ferreira da Silva, a uma praça ou a uma rua?

Um país fica sempre maior ao homenagear os seus maiores.

Agradecimentos por contribuições para este trabalho a:

Eng. Luís Alberto C.M. Ferreira da Silva
Dr. Maurício Antonino Fernandes
Dr.ª Maria Helena Barbosa
Dr. Gonçalves Nemésio

Porto, 27 de Junho de 2003

Síntese e caracterização de pigmentos

um projecto laboratorial de Química na Arte

TEODORA FERREIRA¹, RAQUEL CRISTOVÃO¹ E ANTÓNIO E. CANDEIAS²

Resumo

Esta actividade experimental foi realizada no âmbito da disciplina de Química na Arte da Licenciatura em Química da Universidade de Évora. O trabalho compreende a síntese de pigmentos utilizados em pintura de cavale-

te e a preparação das respectivas têmperas de ovo. Os pigmentos foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho, difracção de raios X de pós e microscopia óptica.

1. Introdução

Por definição, os pigmentos são sólidos inorgânicos insolúveis, finamente divididos, que são suspensos num meio (aglutinante) que adere a uma superfície [1,2]. Os pigmentos são substâncias que funcionam à escala nanométrica como filtros para alguns comprimentos de onda, sendo utilizados para conferir cor, opacidade ou consistência a uma pintura.

Os pigmentos podem ser de origem mineral (malaquite, azul ultramarino, azurite, etc.), resultantes de processos de calcinação (negros de fumo, terra de siena queimada) ou obtidos quimicamente, por via sintética (amarelo de crómio, branco de zinco, azul da Prússia, etc.). Em geral estes materiais são óxidos, carbonatos ou sulfuretos de alguns metais de transição tais como, cobre, ferro, crómio e cobalto ou de outros metais como o chumbo e cálcio [3,4].

A cor dos pigmentos deriva essencialmente de três fenómenos diferentes: transições electrónicas $d-d$ (ex. malaquite, violeta de cobalto), transições por transferência de carga entre um ligando e o metal central (vermelhão, massico-

te) ou entre dois metais (ex. azul da Prússia) [5].

No projecto laboratorial desenvolvido, os alunos tiveram que pesquisar diferentes pigmentos recorrendo a bibliografia disponível e à Internet e propor a síntese de alguns deles com base nos equipamentos e reagentes existentes, na toxicidade e na complexidade do processo.

Nesta actividade experimental seleccionaram-se apenas três pigmentos preparados por reacções de precipitação, o *verditer verde* (malaquite sintética), o *azul da Prússia* e o *amarelo de crómio* que, de algum modo, são representativos de diferentes períodos da história da pintura.

O *verditer verde* ($CuCO_3 \cdot Cu(OH)_2$) é a variante sintética de um mineral verde designado malaquite que pode ser encontrado em muitas regiões do mundo na parte superior de jazidas de cobre, frequentemente associado à *azurite*, outro carbonato básico de cobre(II). Utilizado desde o antigo Egipto, teve particular importância no Séc. XV e XVI sendo referenciado no famoso livro de Cennino Cennini "*Il Libro dell'Arte*". Estes carbonatos básicos de cobre

podem ser facilmente identificados pela reacção com uma solução de ácido clorídrico, ocorrendo libertação de dióxido de carbono.

O *azul da Prússia* ($Fe_4[Fe(CN)_6]_3 \cdot xH_2O$) foi descoberto acidentalmente por Diesbach em 1704 tendo sido um dos pigmentos azuis mais utilizados até 1970, altura em que foi substituído pelo *azul de ftalorianina*. Este pigmento é muito sensível a bases, podendo ser identificado fazendo reagir com uma solução de hidróxido de sódio 4 moldm⁻³, convertendo-se num composto de cor castanha ($Fe(OH)_3$).

Durante os Séc. XVIII e XIX, a Química desenvolve-se como ciência autónoma e universal. Foram descobertos inúmeros elementos, alguns dos quais davam origem a compostos com cores vivas e permanentes que foram utilizados prontamente como pigmentos, tal como o *amarelo de crómio* ($PbCrO_4$), descoberto em 1797 pelo químico francês Louis Vauquelin. Este pigmento pode ser identificado facilmente com sulfureto de sódio, tornando-se negro (PbS).

Nesta actividade os alunos podem ainda preparar têmperas de ovo dos pigmen-

¹ Finalista da licenciatura em Química da Universidade de Évora

² Universidade de Évora, Departamento de Química, Rua Romão Ramalho, 59

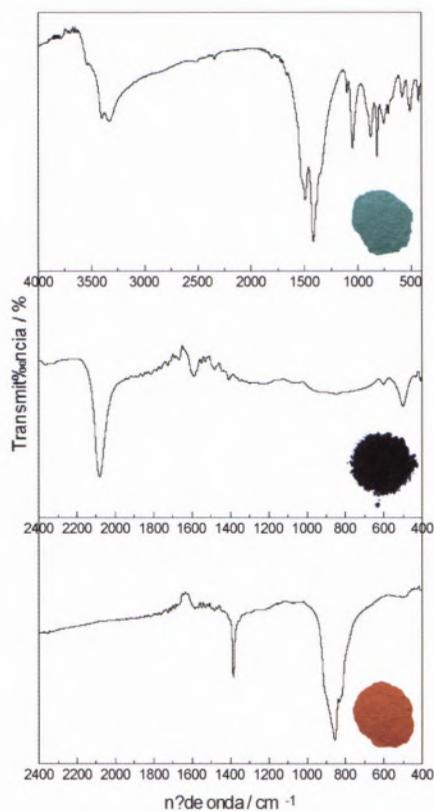


figura 1 Espectros de infravermelho e fotografias dos pigmentos preparados.

tos sintetizados, usando, para o efeito a gema de ovo que é uma emulsão natural contendo óleos gordos, água e os agentes emulsificantes, lecitina e albumina. Este processo foi largamente utilizado na antiguidade clássica e na Idade Média, podendo afirmar-se que quase todas as pinturas de cavalete conhecidas no ocidente entre os séculos XIII e XVI são deste género [6].

Finalmente, o conhecimento material de uma obra de arte e dos processos de deterioração químicos, físicos e biológicos que a mesma sofreu desde a sua

concepção até ao presente é indispensável na prevenção, redução e mitigação dos efeitos de todos os factores que influenciam e ameaçam a sua integridade e conservação. Deste modo, a caracterização física e química de uma obra de arte é, hoje em dia, uma ferramenta crucial no processo de conservação de uma obra.

2. Procedimento experimental

2.1. Preparação dos pigmentos

Síntese do verditer verde [4]

- Dissolver 10 g de $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ em 500 cm^3 de água destilada e manter sob forte agitação mecânica.
- Adicionar à solução anterior 3,5 g de Na_2CO_3 . Durante este processo, ocorre libertação de CO_2 .
- Após cessar a libertação de CO_2 , deixar a mistura reaccional a maturar durante 24 horas, agitando suavemente 2 ou 3 vezes durante este período.
- O precipitado obtido deverá ser filtrado, lavado com água e seco à temperatura ambiente.

Síntese do azul da Prússia [2,7]

- Dissolver 2 g de FeCl_3 em 100 cm^3 de água destilada.
- Dissolver 1 g de $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ em 200 cm^3 de água destilada.
- Misturar as duas soluções num copo de precipitação.
- O precipitado obtido deverá ser filtrado, lavado e seco na estufa à temperatura de 100°C . Nota: a filtração deste pigmento tende a ser muito morosa pelo que poderá efectuar a mesma sob vácuo.

Síntese do amarelo de crómio [4,7]

- Dissolver 8,5 g de $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ em 100 cm^3 de água destilada.
- Dissolver 5 g de K_2CrO_4 em 100 cm^3 de água destilada.
- Misturar as duas soluções num copo de precipitação.

Tabela 1. Atribuição das bandas de IV características de cada pigmento.

pigmento	n.º onda / cm^{-1}	atribuição
verditer verde	3400	Elongação da ligação O-H do grupo hidroxilo
	1400–1500	Flexão da ligação O-C-O do ião carbonato
	820–710	Elongação da ligação C-O do ião carbonato
azul da Prússia	2083–2090	Elongação da ligação C≡N
	606	Elongação da ligação Fe -N
	495	Flexão das ligações C-Fe-C no plano e Fe-C≡N
amarelo de crómio	854–832	Elongação da ligação Cr-O
	905	lão cromato

d) O precipitado obtido deverá ser filtrado, lavado e seco à temperatura ambiente.

2.2. Preparação da têmpera de ovo

- Moer o pigmento com água destilada até formar uma pasta consistente e colocar de lado.
- Separar a gema de ovo da clara. Colocar a gema num papel absorvente e rolá-la de forma a remover completamente os restos de clara de ovo. Pegar na gema e perfurar com um alfinete sobre um gobelet. Adicionar cerca de 1 cm^3 de água destilada e misturar bem.
- Misturar a pasta de pigmento com aproximadamente igual quantidade de gema até obter uma tinta homogénea.
- Verificar a opacidade da têmpera espalhando com um pincel sobre um risco preto numa folha branca. Este ponto deve ser realizado de imediato pois a têmpera de ovo seca rapidamente.

2.3. Caracterização dos pigmentos obtidos

Espectroscopia de FTIR

Preparar pastilhas de pigmento e KBr e obter o espectro de IV. Identificar os grupos funcionais característicos de cada pigmento.

Difracção de raios X

Proceder à análise por difracção de raios X dos pigmentos preparados.

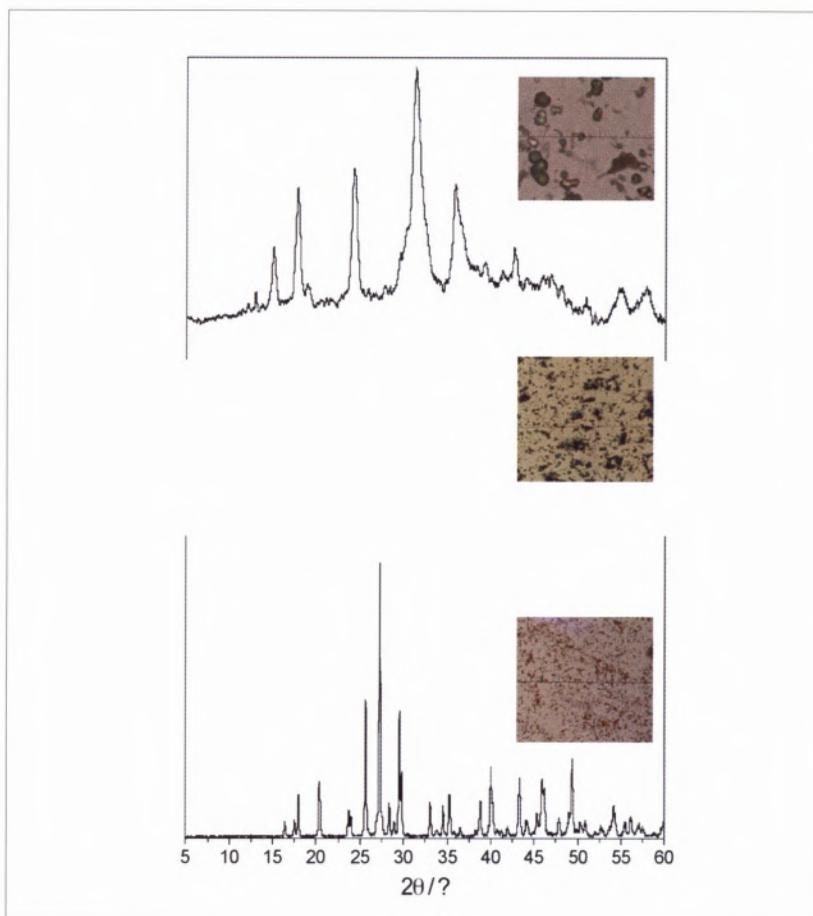


figura 2 Difractogramas de raios X e fotografias obtidas num microscópio óptico com ampliação de 50X dos pigmentos preparados. a) verditer verde b) azul da Prússia c) amarelo de crómio

Comparar os difractogramas obtidos com os respectivos padrões das fichas de difracção de pós.

Microscopia óptica

Espalhar uma fina camada de pigmento seco numa lâmina e colocar num microscópio óptico equipado com câmara fotográfica digital. Caracterizar os cristais

do ponto de vista de granulometria e forma.

3. Resultados e Discussão

Os pigmentos propostos foram preparados com sucesso, tendo-se obtido os rendimentos médios de 80% e 94% para a síntese do verditer verde e do

Tabela 2. Picos mais intensos de difracção de raios X obtidos a partir dos padrões JCPDS de cada pigmento.

verditer verde (72-0075)		azul da Prússia (1-0239)		amarelo de crómio (73-1332)	
d / Å	I/I ₀ / %	d / Å	I/I ₀ / %	d / Å	I/I ₀ / %
5,99	59	5,10	100	4,95	30
5,05	71	3,60	32	4,38	31
3,69	69	2,55	48	3,48	59
2,85	100	1,80	14	3,28	100
2,78	45	1,61	14	3,03	61

amarelo de crómio, respectivamente. Em relação à síntese do azul da Prússia não é possível estabelecer um rendimento devido ao número incerto de águas de hidratação. A título informativo assinala-se apenas que, para o procedimento proposto, obtém-se uma massa média de pigmento final de 0,80 g.

A espectroscopia de infravermelho, e em particular a espectroscopia de infravermelho acoplada a um microscópio óptico, é uma técnica muito utilizada no estudo de pintura de cavalete pois permite a identificação de uma série de pigmentos, aglutinantes e vernizes. Na figura 1 apresentam-se os espectros de infravermelhos obtidos e na tabela 1 a atribuição das bandas mais representativas dos vários pigmentos.

No caso do verditer verde as principais bandas características situam-se entre os 1400 e 1500 cm^{-1} e entre 820 e 710 cm^{-1} e correspondem, respectivamente, aos modos vibracionais de flexão e elongação do ião carbonato sendo indicativas da sua presença. Em particular, a banda a 1490 cm^{-1} apresenta elevada intensidade, tal como se pode observar na figura 1. Finalmente, observa-se ainda uma banda de intensidade média a cerca de 3400 cm^{-1} que corresponde ao grupo hidroxilo (-O-H) [8].

O azul da Prússia pode ser identificado no espectro de infravermelho através da banda característica de elongação do $\text{C}\equiv\text{N}$ a cerca de 2083-2090 cm^{-1} . A presença desta banda neste tipo de espectros permite identificar num pigmento desconhecido o grupo cianeto e por sua vez, o pigmento como sendo o azul da Prússia. As bandas a 606 e 495 cm^{-1} podem ser atribuídas respectivamente à elongação da ligação Fe-N e às flexões das ligações C-Fe-C no plano e Fe-C \equiv N, confirmando a atribuição anterior [9].

Por último o espectro do amarelo de crómio (PbCrO_4) apresenta as principais bandas características no intervalo entre 854 e 832 cm^{-1} correspondentes à elongação Cr-O. O ião cromato deste pigmento pode ainda ser identificado pela presença da banda característica a cerca de 905 cm^{-1} [8].

A difracção de raios X é uma técnica de excelência para a caracterização de sólidos cristalinos, sendo utilizada na caracterização de pigmentos. Os difractogramas obtidos para os vários pigmentos apresentam-se na figura 2.

O difractograma obtido para o pigmento verditer verde foi comparado com o padrão JCPDS n.º 72-0075 correspondente à malaquite. Todos os picos foram identificados com o padrão, com excepção do pico correspondente ao ângulo de 12,88° que possui baixa intensidade relativa (13%) e que pode ser atribuído ao pico mais intenso da carbonatrite (JCPDS n.º 83-2253), um carbonato de sódio e cobre hidratado, que seria possivelmente uma impureza cristalina deste pigmento, formada por co-precipitação.

Tal como seria de esperar, o difractograma obtido para o azul da Prússia apresenta poucos picos, reflectindo a sua estrutura cúbica de faces centradas, e é típico deste material. Foi possível identificar todos os picos com o padrão JCPDS n.º 1-0239 correspondente ao $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$. A largura dos picos obtidos no difractograma deve-se à natureza coloidal deste pigmento.

Em relação ao amarelo de crómio, todos os picos do difractograma obtido foram identificados com o padrão JCPDS n.º 73-1332 correspondente à crocoite revelando que se trata de uma fase pura de cromato de chumbo.

Na tabela 2 apresentam-se os 5 picos mais intensos de cada ficha padrão.

A microscopia óptica é um meio de diagnóstico utilizado na análise de ponto em pintura, pois permite obter informação sobre a composição da pintura e identificar, em alguns casos, os pigmentos pela morfologia, dimensão e propriedades ópticas e químicas dos seus cristaltos. As fotografias obtidas num microscópio óptico com ampliação de 50x operando em luz transmitida, apresentadas na figura 2, revelam a natureza coloidal dos vários pigmentos e são típicas de materiais preparados por precipitação, verificando-se, no entanto, que os cristaltos do verditer verde são de maior dimensão que os restantes.

Tanto o azul da Prússia como o verditer verde possuem cristaltos transparentes reflectindo os baixos índices de refração destes pigmentos, respectivamente, 1,56 e 1,65, enquanto que o amarelo de crómio que possui $\eta = 2,31$ é mais opaco. No caso do azul da Prússia, verifica-se que possui cristaltos, que resultam da agregação de partículas submicroscópicas, com granulometria variada e forma de flocos lamelares, enquanto que, os cristaltos do amarelo de chumbo são prismáticos e de dimensão mais homogénea. Finalmente, deve referir-se que alguns cristaltos do azul da Prússia apresentam tonalidade avermelhada, o que pode ser devido às condições de preparação, como pH, concentração, temperatura, etc [9].

4. Considerações finais

A metodologia adoptada nesta actividade experimental permite aos alunos familiarizarem-se com alguns pigmentos utilizados em pintura de cavalete e utilizar algumas técnicas comuns na caracterização e identificação dos materiais que constituem as obras de arte. A preparação dos pigmentos e das têmperas pode ser facilmente realizável em qualquer laboratório do ensino secundário podendo ser complementada por uma actividade de aplicação das têmperas em diversos suportes (papel, tela, etc.).

Bibliografia

- [1] <http://ciarte.no.sapo.pt>
- [2] <http://webexhibits.org/pigments/>
- [3] A. J. Cruz, *1.ª Encontros de Conservação e Restauro-Tecnologias*, Instituto Politécnico de Tomar, Tomar, 2000.
- [4] M. Berry, C. Osborne e A. Peppin, *The Chemistry of art*, J. Johnston (ed.), Royal Society of Chemistry and the National Gallery Company, 1999.
- [5] M.V. Orna, *J. Chem. Ed.* **57** (1980) 264.
- [6] J. Rudel, *Técnica da pintura*, 2.ª ed., Publicações Europa América, Mem-Martins.
- [7] M.V. Orna, *J. Chem. Ed.* **57** (1980) 267.
- [8] R. Newman, *J. Am. Inst. Conserv.* **19** (1979) 42.
- [9] B.H. Berrie in *Artists Pigments – A handbook of their history and characteristics – vol.3*, E. W. Fitzhugh (ed.), Oxford University Press, New York, 1997, p.191.

A magia da cor: a química de um fogo-de-artifício*

O tradicional fogo-de-artifício é uma das mais espetaculares experiências de química, que todos conhecemos e admiramos. A história da química está ligada à história destas demonstrações espetaculares e poderosas, aos alquimistas e às suas “artes mágicas”, e às suas demonstrações experimentais nas cortes reais. A grandes professores como Justus von Leibig, Michael Faraday e Georg Lichtenberg, entre outros, se deve muito desta “química do espectáculo”.

Foram grandes vultos da Química quem conduziu o fogo-de-artifício à sua mais perigosa, mas também mais brilhante forma. Quando Antoine Laurent de Lavoisier (1743–1794) estabeleceu a sua teoria de que os ácidos continham oxigénio, nunca terá imaginado que esta ideia conduziria a um avanço espectacular nos fogos-de-artifício. Claude Louis Berthollet (1748–1822), contemporâneo e amigo de Lavoisier, enveredou na procura do oxigénio nos ácidos. Não o encontrou em todos, mas devido a essa busca descobriu novos ácidos contendo oxigénio e a ele se deve a preparação de uma substância perigosa, o clorato de potássio. Berthollet cedo descobriu que esta substância quando aquecida libertava, num curto espaço de tempo, todo o oxigénio que continha, e que durante essa conversão se atingiam temperaturas extremamente elevadas. Lavoisier pensou imediatamente na possibilidade de misturar o clorato na pólvora usada pela armada francesa. Por esse motivo pediu que se preparasse uma grande quantidade desta substância no “Moinho de Pólvora” Real de Essones, o que infelizmente condu-

ziu a uma detonação accidental que provocou vários mortos, enquanto Lavoisier e Berthollet se tinham ausentado para um pequeno passeio. Este acidente não impediu que o clorato de potássio continuasse a ser utilizado e que posteriormente levasse à descoberta de outras substâncias ainda mais reactivas. A elevada temperatura de combustão do clorato de potássio depressa se popularizou nas oficinas de fogo-de-artifício, especialmente na Ásia, onde desde esse momento a utilização de misturas de clorato e enxofre puros assegurou um máximo de brilho nas cores dos fogos, mas também um enorme aumento nas perdas humanas entre fabricantes e utilizadores. Na UE, o fabrico de fogo-de-artifício baseado em misturas de enxofre-clorato é proibido.

Mas a que se deve a cor? Os tons de laranja dos primeiros fogos-de-artifício são largamente produzidos por radiação do corpo negro (brilho de partículas sólidas muito quentes). Os verdes e os vermelhos são devidos à emissão espectral de átomos excitados na fase gasosa. A utilização de magnésio (1860) e alumínio (1888), metais de combustão fácil, veio aumentar o brilho dos fogos. A mistura de aparas de titânio levou a uma maior duração dos efeitos.[1]

Ainda que actualmente se obtenham cores brilhantes com maior segurança, as novas gerações de cores de fogos-de-artifício funcionam segundo os mesmos princípios do fogo-de-artifício tradicionais.[2]

Interesse da Actividade

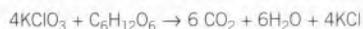
As cores emitidas por um átomo dependem de como os seus electrões estão distribuídos, da sua estrutura electrónica. Os testes de chama são dos mais antigos métodos de identificação de um elemento. O cloreto de sódio, um composto utilizado no dia-a-dia, pode ser dado como exemplo. Investigando as cores que os átomos emitem é possível determinar a sua estrutura interna, sendo este conhecimento de crucial importância para compreender a tabela periódica, as propriedades dos elementos, os compostos que eles formam e as reacções em que participam, ou até as cores do fogo-de-artifício.[3] O modelo atómico, que presentemente utilizamos, teve a sua

origem na análise da luz emitida pelos átomos; os espectros de linha de um átomo são bem diferentes do padrão contínuo obtido quando se faz passar a luz branca do sol através de um prisma. Por este motivo esta actividade pode ser enquadrada tanto a um nível elementar de estudo do átomo e da sua estrutura electrónica como para a introduzir conceitos de mecânica quântica, e algumas das perguntas e respostas luminosas que ajudaram grandes cientistas a aceitar o modelo quântico, ainda que a contragosto! Para além disso, são um belíssimo exemplo de Química descritiva e como tal poderão ser utilizados em cadeiras de Química Geral ou Inorgânica.

Acerca da Actividade

Esta actividade pode ser desenvolvida numa hotte, num laboratório de química ou, numa sala grande com boa ventilação, desde que se tomem precauções de segurança e se ajustem as quantidades à dimensão da sala, pois ocorre libertação de fumo em grande quantidade. Devido à perigosidade do clorato de potássio o professor deverá prestar especial atenção à fase da mistura com o açúcar-nitrato. *A mistura dos vários compostos não deverá nunca ser moída em almofariz! É perigoso e explosivo!* Compostos orgânicos podem reagir de forma explosiva com o $KClO_3$. [5] Utilizar sempre óculos de protecção e luvas.

Durante a reacção, o clorato de potássio, assim como os nitratos, são reduzidos e o açúcar é oxidado a vapor de água e dióxido de carbono:



e assim sucessivamente para os outros nitratos. Posteriormente, e devido às elevadas temperaturas, formar-se-ão, a partir dos seus sais, os átomos metálicos, que por sua vez e ainda devido às temperaturas elevadas, darão origem a átomos excitados; estes átomos libertando-se da energia em excesso por emissão de luz são os responsáveis finais pelas esplêndidas cores observadas. [6] Além dos átomos excitados poderão também formar-se outras espécies excitadas que emitam no visível; por exemplo o ião molecular $BaCl^+$ ou $SrCl^+$, para os sais de bário ou estrôncio.

Nas condições térmicas predominantes o sal de sódio emite uma luz amarelo-alaranjada, o de estrôncio uma luz vermelho-carmim e o de bário uma luz verde-ténue. Estes efeitos são utilizados na caracterização espectroscópica dos elementos assim como na pirotecnia.

Respostas às perguntas:

1- Ver etimologia da palavra *artificio*; citação do Leonardo: “Onde a natureza finda de produzir as suas espécies, começa o homem, em harmonia com as leis da natureza, a criar uma infinidade de espécies”; “A psicanálise do fogo” de Gaston Bachelard.

2- Quando os cientistas fizeram passar a emissão de certos elementos através de um prisma, observaram a existência de linhas de cor intervaladas

com zonas negras; ou seja, o espectro de emissão não é contínuo, é um espectro de linhas. Esta observação, assim como a própria existência da Tabela Periódica proposta por Mendeleev, não podiam ser explicadas com o modelo atómico (de Rutherford) aceite na época.

3- Um espectro é uma imagem que reflecte a estrutura electrónica; como cada elemento tem uma estrutura electrónica característica, o seu espectro pode servir como uma impressão digital.

Referências

- [1] F. R. Kreißl, O. Krätz, “Feuer und Flamme, Schall und Rauch. Schauexperimente und Chemiehistorisches”, Wiley-VCH, 1999, p. 99-104.
- [2] E. Wilson, *Chem. Eng. News*, 79 (2002), 30.
- [3] P. Atkins, L. Jones “Chemistry, molecules, matter and change”, 3rd Ed, Freemant, 1997, cap. 7.
- [4] S. Russo e M. Silver “Introductory Chemistry” Benjamin Cummings,

- 2.^aed., 2002. pp107-108 e 119-121; de salientar que os autores intitulam a primeira secção do capítulo dedicado ao moderno modelo do átomo, *Seeing the light- a new model of the atom*.
- [5] H. W. Roesky, K. Möckel, “Chemical curiosities: spectacular experiments and inspired quotes”, VCH, 1996, pp 45-47.
- [6] K. Nassau, “Experimenting with color”, Grolier Publishing, 1997, capítulo 6.

O vermelho, o branco e o azul dos fogos-de-artifício não são mais do que a luz emitida por átomos e moléculas energeticamente excitadas. O fenómeno responsável pela luz espectacular de um fogo-de-artifício está também na origem das cores observadas na iluminação das ruas, em muitos anúncios luminosos, ou ainda pela emissão amarelo-alaranjada, característica do sódio, que ocorre frequentemente nas nossas cozinhas sempre que alguns cristais de sal de cozinha caem na chama. Por acção da chama o cloreto de sódio (sal) é separado nos seus iões, ficando o átomo de sódio com 1 electrão desemparelhado na última orbital. A elevada temperatura da chama vai permitir formar átomos de sódio no estado excitado. O átomo de sódio excitado perderá o seu excesso de energia em parte por emissão de calor em parte por emissão de luz. O actual modelo do átomo mostra que um electrão num átomo só pode existir numa série de estados discretos, denominados níveis de energia. Assim, o átomo de sódio só pode absorver e emitir energia de determinados valores, correspondentes à diferença entre esses níveis, ou seja, a energia dos electrões de um átomo está quantificada. Deste modo a energia não é emitida ou absorvida num contínuo, mas sim em intervalos determinados pela estrutura electrónica, e por esse motivo característicos, de cada átomo. A maior parte da energia que é libertada por um átomo de sódio excitado tem o valor de 3.38×10^{19} J, ou seja, um comprimento de onda igual a 589 nm, o que corresponde a uma bela e intensa cor amarela. Os químicos podem pois utilizar este tipo de

testes de chama para verificar/indagar se o sódio se encontra presente numa determinada amostra ou composto. E quem diz o sódio diz toda uma série de outros metais.

É a elevada temperatura de combustão que permite a fusão e a queima de aparas de metal durante a detonação de um corpo de fogo-de-artifício e que dá origem aos processos químicos responsáveis pela cor. A cor observada deve-se à emissão de fotões quando ocorre transição dos electrões energeticamente excitados, de níveis de energia elevados para níveis de energia mais baixos, o que pode ocorrer tanto em átomos como em moléculas.

A história do fogo-de-artifício está, como não podia deixar de ser, ligada à história da química e alguns químicos famosos contribuíram ao longo dos tempos para que os fogos pudessem ser cada vez mais coloridos e espectaculares. A descoberta de compostos comburentes mais reactivos permitiu elevar as temperaturas atingidas durante a detonação dos fogos e a utilização de uma maior gama de compostos metálicos com elevadas temperaturas de combustão. Neste ponto as teorias de Lavoisier dos ácidos e os trabalhos de Berthollet foram essenciais, tendo levado à descoberta do clorato de potássio, utilizado nesta demonstração. O entendimento dos fenómenos químicos que permitiram um maior controlo do brilho e da cor dos fogos-de-artifício está associado às teorias da constituição da matéria, nomeadamente à moderna Teoria do Átomo.



fogo verde; demonstração para o sal de bário no seu início e no final;

fogo amarelo, demonstração para o sal de sódio: (a chama emitida é de um bellissimo amarelo, no entanto é tão intensa que não foi possível captar a cor).

Experimente

Reagentes:

Fogo Amarelo	Fogo Verde	Fogo Vermelho
4 g Cl. de Potássio KClO ₃	4 g Cl. de Potássio KClO ₃	4 g Cl. de Potássio KClO ₃
4g Nit.de Sódio NaNO ₃	6.2g Nit. de Bário Ba(NO ₃) ₂	5 g Nit. de Estrôncio Sr(NO ₃) ₂
5 g Açúcar	5 g Açúcar	5 g Açúcar

Segurança

O clorato de potássio é comburente e tóxico, o nitrato de sódio e o nitrato de

estrôncio são também comburentes, o nitrato de bário é tóxico. Esta demonstração só deve ser realizada por pessoas qualificadas! O uso de óculos de segurança e luvas é imprescindível! A quantidade dos reagentes a utilizar deve ser ajustada à sala onde as experiências vão ser realizadas uma vez que durante a reacção exotérmica ocorre forte libertação de fumos. (Num laboratório de aulas pode realizar-se a experiência numa hotte).

Perigo de explosão: As substâncias nunca devem ser triturasas juntas no mesmo almofariz.

Materiais:

Almofariz, 3 copos de precipitação de 1 L, 3 recipientes resistentes ao calor (p.e. prato de cerâmica, Ø aprox. 30 cm), 1 Pena 1 estrela mágica (das utilizadas nos bolos de aniversário como foguete)

Procedimento:

O clorato de potássio, o açúcar e os diversos nitratos deverão ser finamente triturados, **separadamente**, num almofariz.

Antes da demonstração o clorato de potássio deve ser misturado com a correspondente mistura açúcar-nitrato. Para evitar perigo de explosão esta mistura deve ser feita muito cuidadosamente, num copo de cristalização, com uma pena ou por agitação ligeira do copo. A mistura é colocada num

recipiente resistente ao calor e a ignição é feita com uma estrela mágica, também conhecido nas pastelarias como foguete para bolos de aniversário.

Eliminação de resíduos:

Os resíduos do fogo devem ser colocados em água e tratados com carbonato de sódio. Após separação por sedimentação e decantação, os resíduos sólidos deitam-se no lixo e a água pode ser despejada no esgoto normal.

Para responder

- O nome "fogo-de-artifício" é poético e muito adequado ao fenómeno observado. Comente.
- Porque foi importante a obtenção de espectros de riscas de elementos

no desenvolvimento da moderna teoria atómica?

- Porque é possível utilizar a cor emitida para identificar a presença de um elemento?

Estudo sobre "Quantidade de substância" e Mole

ANA F. P. ABRANTES*, CATARINA S. G. VIEIRA* E M. FERNANDA P. SILVA**

Resumo

Neste trabalho procurou averiguar-se que conhecimento possuem professores profissionalizados com vários anos de experiência, professores em profissionalização (estágio integrado no último ano da licenciatura) e alunos do 1.º ano da universidade, acerca de "quantidade de substância" e de *mole*. Aplicou-se um inquérito com perguntas e questões para comentar.

Verificou-se identificação da grandeza "quantidade de substância" com a sua unidade, *mole*, identificação quer de *mole*, quer de "quantidade de substância", com massa, número de moles, número de partículas e constante de Avogadro, falta de conhecimento sobre a origem e evolução histórica dos conceitos e não identificação da definição de *mole*.

1. Introdução

O conceito de *mole* tem sido objecto de investigação nas últimas décadas em diferentes países. A maioria dos aspectos investigados referem-se a dificuldades de aprendizagem, dificuldades de ensino, pré-requisitos necessários para a aprendizagem, origem e evolução histórica do conceito, análise do conceito em livros de texto, etc. Estudos envolvendo, além da *mole*, também o conceito de "quantidade de substância", referem quer dificuldades de aprendizagem dos alunos, quer conhecimentos dos professores sobre os conceitos em si (1).

Dos trabalhos publicados com dificuldades de aprendizagem referem-se alguns: sobre cálculos estequiométricos com métodos algorítmicos envolvendo a *mole* (2–4) e a "quantidade de substância" (5–7); sobre identificação de *mole* com massa e número de partículas ou considerando a *mole* como uma propriedade de uma molécula (8–10); sobre concepções erradas dos alunos em que a "quantidade de substância" se confunde com massa de reagente ou

com massa molar de reagente (10) ou com concentração(6); sobre concepções dos alunos acerca do significado de "1 mol"(11), etc.. Dos trabalhos publicados com estudos efectuados com professores pode referir-se os relativos a diferentes concepções qualitativas que os mesmos têm acerca de *mole* e ao modo como introduzem a noção (como um número ou como massa, para posteriormente formalizarem relações matemáticas) (11–13), desconhecimento sobre a origem e evolução sofrida pelos conceitos "quantidade de substância" e *mole* (14), etc..

Os resultados foram obtidos, no geral, com uma população diversificada de professores (efectivos, estagiários e universitários) e alunos desde o ensino secundário ao universitário (16–19 anos).

Em Portugal só se conhece um estudo acerca das dificuldades de aprendizagem do conceito de *mole*, efectuado com professores (15). O presente estudo foi efectuado com alunos do 1.º ano da Universidade de Aveiro (U.A.) inscritos na disciplina de Química (2.º semes-

tre); professores do estágio integrado da Licenciatura em Ensino da Física e da Química daquela Universidade e professores efectivos de escolas de Aveiro e de Coimbra, no ano lectivo 2001/2002; tem como objectivos averiguar quais as ideias que professores profissionalizados com vários anos de experiência e professores em profissionalização (alunos do último ano da licenciatura em ensino da Física e da Química) e alunos do 1.º ano da U.A. possuem acerca dos conceitos em questão, e fazer a comparação entre os resultados de cada grupo de inquiridos.

2. Parte experimental

2.1 Questionário e amostras usadas

O trabalho experimental foi efectuado através da aplicação de um questionário. Da população alvo constam três grupos distintos: os alunos do 1.º ano de quatro turmas práticas da disciplina de Química, leccionada no 2.º semestre do ano lectivo de 2001/02, na Universidade de Aveiro, em número de 55 (N=55);

professores estagiários do núcleo de estágio integrado da licenciatura em Ensino de Física e Química daquela Universidade, no mesmo ano lectivo, em número de 18 (N=18); e professores com experiência de escolas de Aveiro e Coimbra em número de 29 (N=29).

O questionário era composto de onze questões para os professores e sete para os alunos, sendo estas comuns à dos professores. Destas sete questões comuns uma era uma pergunta acerca de "quantidade de substância", e as outras seis eram frases para comentar. Estas frases continham todas a palavra *mole*, uma delas correctamente e as outras cinco num contexto errado. As frases incorrectas foram retiradas de dois livros de texto aconselhados para o ensino secundário (16–17) e de um para o ensino superior (18), reconhecido internacionalmente. Das outras quatro questões dos professores uma era acerca da origem e evolução do conceito de *mole*, e as outras três estavam directamente relacionadas com a experiência profissional do professor.

Pediu-se que as respostas fossem dadas individualmente, após o acto da leitura, sem recurso a qualquer tipo de consulta. Os alunos deram as respostas nos últimos dez minutos de uma aula prática de duas horas.

Com as diferentes questões do inquérito, pretendia-se, de entre outros objectivos, verificar se os inquiridos sabem qual a origem e evolução histórica dos conceitos de "quantidade de substância" e de *mole*, que a *mole* é a unidade da grandeza "quantidade de substân-

cia" e que não deve ser confundida com a própria grandeza, que nem a "quantidade de substância" nem a *mole* devem ser consideradas como número de quaisquer partículas ou como massa (embora entre massa e "quantidade de substância" haja uma relação de proporcionalidade (19)).

2.2 – Resultados e sua análise

Os resultados obtidos são apresentados em paralelo para os três grupos de inquiridos.

Na tabela 1 encontram-se os resultados obtidos com a questão 1:

Questão 1. Em Ciência cada grandeza tem definida a sua unidade, mediante uma convenção e aceitação universal. Considere a grandeza quantidade de substância. Qual o significado físico desta grandeza? (14)

Como se pode observar pela tabela 1 a mais elevada percentagem de respostas dos professores (44,8%) e dos estagiários (33,3%) inquiridos diz respeito à identificação da grandeza "quantidade de substância" com número de partículas, enquanto que nos alunos a maior percentagem se refere a "número de moles"; os professores e os estagiários identificam o significado físico de "quantidade de substância" com a sua unidade, *mole*, e apenas 6,9% dos professores e 16,7% dos estagiários conhecem o significado físico da grandeza (resposta correcta). A confusão de "quantidade de substância" com massa (3,6%) e com a constante de Avogadro (5,5%) verifica-se apenas nos alunos. As respostas classificadas como incoerentes são

respostas que não têm nada a ver com o que se pergunta.

Das várias perguntas em que o objectivo era verificar a identificação de *mole* com número de partículas apresentam-se os resultados de duas, questões 6 e 7.

Na tabela 2 apresentam-se os resultados referentes à questão 7:

Questão 7 – Comente a seguinte frase: "A mole é uma medida de quantidade de substância, expressa por um número, 6×10^{23} , tal como outras unidades de medida: a dezena, a dúzia, o quarteirão, etc..." (17)

Da análise da tabela 2 verifica-se que há confusão de *mole* com constante de Avogadro por parte dos três grupos de inquiridos; os professores são os que o fazem em maior percentagem, 58,6%, seguindo-se os estagiários com sensivelmente metade, 27,8%. As respostas correctamente dadas verificam-se em maior percentagem nos estagiários, 33,3%.

Com a questão 6:

Comente a frase: "1 mole (1 mol) é o número de átomos em exactamente 12 g de carbono-12" (18),

verificou-se identificação de 1 *mole* com número de partículas pela maioria dos professores (34,5%) e estagiários (38,9%), apresentando ambos percentagens idênticas de respostas incoerentes (~34%); os alunos fazem a identificação de *mole* com massa em maior percentagem (29,1%), mas 32,7% não sabem ou não respondem.

Tabela 1 – Identificação da grandeza "quantidade de substância" com *mole*, n.º moles, massa, n.º partículas, em %

Grupo	Mole	N.º de Moles	Massa	N.º de Partículas	Constante de Avogadro	Resposta Correcta	Resposta Incoerente	Não sabe Não responde
Prof.s	20,7	6,9		44,8		6,9	17,2	3,4
Estag.s	16,7	5,6		33,3		16,7	22,2	5,6
Alunos		34,6	3,6	5,5	5,5		12,7	36,0

Tabela 2 – Identificação da unidade *mole* com constante de Avogadro, em %

Grupo	N.º de Partículas	Constante de Avogadro	Resposta Correcta	Resposta Incoerente	Não sabe / Não responde
Prof.s		58,6	17,2	24,1	
Estag.s		27,8	33,3	5,6	33,4
Alunos	3,6	18,2	14,6	32,7	30,9

Tabela 3 – Identificação da definição de *mole* segundo a IUPAC

Grupo	Massa	N.º de Partículas	Resposta Correcta	Resposta Incoerente	Não sabe / Não responde
Prof.s			17,2	20,7	62,1
Estag.s			27,8		72,2
Alunos	9,1	1,8	12,7	9,1	67,3

Uma das questões do inquérito dizia respeito à definição da unidade *mole*. A definição foi proposta em 1961 pela União Internacional de Física Pura e Aplicada, adoptada em 1965 pela União Internacional de Química Pura e Aplicada e estabelecida em 1971 pela 14.ª Conferência Geral de Pesos e Medidas (CGPM); tem a redacção apresentada na questão 11:

Questão 11. Comente a seguinte frase: "A mole é a quantidade de substância de um sistema que contém tantas entidades elementares quantos os átomos que existem em 0,012 kg de carbono-12" (20)

Os resultados obtidos com esta questão encontram-se na tabela 3.

Pode observar-se que a maior percentagem das respostas dadas pelos elementos dos três grupos de inquiridos, correspondem ao não reconhecimento da

definição de *mole* (não sabe / não responde) segundo as indicações da 14.ª CGPM. Dos professores 17,2% conhecem a definição correcta e dos professores em estágio são 27,8% os que sabem a definição correcta.

O resultado da questão 5, posta a professores e a estagiários:

Questão 5. Tem alguma informação sobre a origem histórica e sobre a evolução histórica do conceito de mole? Se sim, comente-a (14),

mostrou que apenas 3,4% dos professores tinha conhecimento fazendo referência aos trabalhos realizados pelo professor espanhol Rafael Azcona; dos estagiários verificou-se não possuírem informação significativa; destes quem apresentou alguma informação apenas refere que o conceito teve origem em experiências feitas por Avogadro sobre gases.

Das três questões directamente relacionadas com a experiência profissional dos professores a pergunta 4 era:

Que aspectos o professor deve ter em consideração na introdução do conceito de mole na aula?" (14);

o resultado do inquérito revela que a maioria dos professores acha que se deve relacionar a *mole* com outras unidades de medida do conhecimento dos alunos, que se deve fazer comparação com a dúzia, dezena, etc (evidenciando a confusão entre a unidade e o número de partículas) embora outros achem que se deve fazer bem a distinção entre a grandeza "quantidade de substância" e a sua unidade (opinião partilhada também por estagiários), realçando a diferença com massa, volume e número de partículas. Alguns estagiários dizem que se deve dar atenção às concepções alternativas, e outros dizem que o profes-

sor deve estar bem familiarizado com o conceito e ter as ideias bem claras e estruturadas para o conseguir transmitir de forma correcta.

A pergunta 2 referia-se à idade do aluno mais adequada para a introdução do conceito "quantidade de substância", se no 8.º ou no 10.º ano de escolaridade: a maioria, quer dos professores, quer dos estagiários, é de opinião que deve ser no 10º ano, apontando como razão principal o facto de o conceito ser abstracto e de difícil compreensão; os que não concordam acham que deve ser o mais cedo possível para que o mesmo se vá interiorizando gradualmente.

Sobre a pergunta 3, acerca do modo como o conceito é abordado nos manuais escolares, a opinião geral dos estagiários que se pronunciaram é que o conceito é abordado de forma pouco precisa e com poucos exemplos, podendo reforçar as concepções alternativas dos alunos; dos professores há quem tenha a mesma opinião, mas há quem considere que alguns livros apresentam abordagens correctas.

A análise das frases retiradas dos manuais escolares utilizados neste trabalho e incluídas no questionário mostram que há falta de rigor na definição de *mole* e no significado de "quantidade de substância". Num dos livros, "1 *mole*" é o "número de átomos..." (18); em outro livro aparecem duas definições diferentes de *mole*, uma em que esta unidade é identificada como "uma medida de quantidade de substância, expressa por um número...", e a outra em que a *mole* é identificada como a "quantidade de substância que contém tantas partículas...", e ainda, noutra frase, faz-se a identificação de "quantidade de substância" com "número de *moles*", "número real de partículas" e "massa" (17); no outro livro utilizado neste trabalho aparece a definição de "concentração de uma substância numa solução" como sendo "número de *moles* de substância ..." (16).

3 – Conclusões

O domínio dos conceitos que se pretendem ensinar, isto é, a familiarização com os conceitos e a clareza e estruturação das ideias por parte de quem lecciona é

muito importante para a correcta transmissão de conhecimentos.

Verificou-se, pelos resultados obtidos, que de entre os professores há quem não tenha as ideias bem esclarecidas, fazendo a identificação de *mole* com número de *moles* e com constante de Avogadro, desconhecendo a definição de *mole* segundo a 14.ª CGPM (alguns considerando que a definição é "inadequada, confusa, errada,..."), desconhecendo o significado físico da grandeza "quantidade de substância" (já que a identificam com números de partículas e de *moles*). Não se observou nos professores conhecimento acerca da origem e evolução do conceito de *mole*.

Os resultados dos professores estagiários são mais positivos que os dos professores, nalguns aspectos, por exemplo, no significado físico de "quantidade de substância", mas na definição correcta de *mole* segundo a 14.ª CGPM estão equiparados. Os resultados dos estagiários também são, de uma forma geral, mais positivos que os dos alunos, o que leva a concluir que houve evolução dos conceitos com o aumento de formação científica.

O facto de os alunos não terem conhecimento do significado físico de "quantidade de substância", pode ser resultante do facto de professores e estagiários utilizarem, na sua maioria, a expressão "número de moles" para designar aquela grandeza.

É de notar o facto de grande percentagem de respostas dadas por professores e por estagiários, serem desajustadas às perguntas feitas, facto que revela pouco esclarecimento e falta de familiarização com os conceitos.

Nos livros de texto consultados observou-se alguma falta de rigor na terminologia científica utilizada para os conceitos em questão.

Bibliografia:

1 C. Furió, R. Azcona e J. Guisola, *Enseñanza da Las Ciencias*, 20(2) (2002) 229

2 J. N. Lazonby, J. E. Morris e D.J. Waddington, *Journal of Chemical Education*, 62(1) (1985) 60

3 J. R. Staver e A. T. Lumpe, *Journal of Research in Science Teaching*, 32(2) (1995) 177

4 D. Gabel e R. D. Sherwood, *Journal of Research in Science Teaching*, 21(8) (1984) 843

5 M. J. Frazer e D. Servant, *Education in Chemistry*, 23(2) (1986) 54

6 A. Vincent, *Education in Chemistry*, 18(4) (1981) 114

7-H.-J. Schmidt, *International Journal of Science Education*, 16(2) (1994) 191

8 S. Novick e J. Menis, *Journal of Chemical Education*, 53(11) (1976) 720

9 R. Cervellati, A. Montuschi, D. Perugini, N. Grimellini-Tomasini e B. Pecori Balandi, *Journal of Chemical Education*, 59(10) (1982) 852

10 H.-J. Schmidt, *International Journal of Science Education*, 12(4) (1990) 457

11 A. Tullberg, H. Stromdahl e L. Lybeck, *International Journal of Science Education*, 16(2) (1994) 145

12 H. Stromdahl, A. Tullberg e L. Lybeck, *International Journal of Science Education*, 16(1) (1994) 17

13 P. G. Nelson, *Education in Chemistry*, 28(4) (1991) 103

14 C. Furió, R. Azcona e J. Guisola, *Enseñanza da Las Ciencias*, 17(3) (1999) 359

15 M. E. Elias e A. Elias, *Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, 12 (1982) 8

16 S. Formosinho, V. Gil, J. Dias e A. Cardoso, *Química para Ti*, 8.º ano, 2.ª edição. Coimbra: Livraria Minerva, 1987

17 L. Mendonça e M. Ramalho, *No mundo em transformação*, Química-8.º ano. Lisboa: Texto Editora, 1991

18 L. Jones e P. Atkins, *Chemistry: Molecules, Matter and Change*, 4.ª ed., Freeman: New York, 2000, p.64

19 M. E. Jardim e M. P. Pereira, *Terminologia, Símbolos e Unidades para Grandezas Físico-Químicas*, Lisboa: Escolar Editora, 1985, p.19

20 I. M. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay e K. Kuchitsu, *Quantities, units and symbols in physical chemistry*, Oxford: Blackwell, 1988, p.64

A Internet no desvendar da ciência em casa

VASCO SÉRGIO CORREIA FREITAS SILVA*

Resumo

A importância da execução de experiências exploratórias simples (com recurso a materiais de uso quotidiano) na contextualização da ciência com a vida real tem sido amplamente reconhecida por professores e cientistas. Tendo em conta o fraco interesse dos portugueses pelas ciências Química e Física, a divulgação na Internet de actividades

práticas envolvendo estas ciências pode ser utilizada como um complemento aos meios tradicionais de ensino. Neste contexto, esta comunicação apresenta o sítio de Internet "Ciência em Casa" (<http://cienciaemcasa.cienciaviva.pt>) como fonte de conteúdos científicos com real valor pedagógico para a divulgação de actividades experimentais simples no âmbito da Química e Física.

1. Introdução

O conhecimento do cidadão comum em ciências é comprovadamente insuficiente e, cada vez mais, os jovens não demonstram grande interesse pela ciência, fundamentalmente pela Química e Física [1]. Estas ciências foram sempre definidas como ciências sofisticadas, próprias de cientistas que trabalham com sistemas caros e complicados. Em Portugal, os locais assumidos como próprios para a ciência acontecer são desde sempre as escolas, universidades e centros de ciência.

De maneira a despertar o interesse na população portuguesa pela ciência, tem vindo a verificar-se um aumento do investimento nos espaços vocacionados para o ensino e aprendizagem desta: escolas e centros de ciência. As escolas passaram a ser equipadas com material pedagógico e científico para facilitar o trabalho dos professores no ensino das ciências. Igualmente, os programas das disciplinas apresentam diversas propostas de actividades práticas interessantes para serem implementadas na sala de

aula [1]. Nas aulas, o professor investe cada vez mais tempo em conteúdos experimentais que permitem aos alunos o contacto directo com os conceitos leccionados. Relativamente aos centros de ciência, em Portugal tem sido realizado um investimento considerável em centros "Ciência Viva" que têm desempenhado um papel importante na divulgação da ciência. Para além de apresentarem diversas actividades práticas num ambiente informal, organizam igualmente outras actividades fora dos recintos de exposição. Na actualidade, Portugal conta com cinco centros "Ciência Viva" e no futuro está prevista a abertura de mais nove [2].

No entanto, em geral, o cidadão comum ainda desconhece o facto da ciência estar sempre presente na vida real. Por exemplo, a Química e a Física são ciências que podem ser facilmente experimentadas em casa, com materiais pouco sofisticados ou de uso corrente. Como ciências especialmente ligadas ao dia-a-dia, estas proporcionam os ingredientes indispensáveis ao desenrolar de um ambiente ideal de ensino-aprendi-

zagem [3]. O desvendar destas ciências em casa, a partir de actividades práticas, desperta curiosidade, motivação e interesse pela aprendizagem dos fenómenos físico-químicos do quotidiano. Actualmente existem no mercado diversos livros de actividades exploratórias simples que podem ser implementadas com materiais de uso corrente [4-10].

Nos últimos anos, as inovações tecnológicas têm vindo a possibilitar diversos meios alternativos de ensino e aprendizagem [11]. Meios pedagógicos não impressos, incluindo CD-ROM, cassetes vídeo e, principalmente, Internet, possibilitam formas interactivas de divulgação da ciência. Através de conteúdos multimédia, esta pode ser apresentada de uma forma mais completa e atraente em comparação com o texto ou discurso convencional [2]. A modo de exemplo, a Internet pode combinar texto, áudio, ilustrações e elementos dinâmicos como, por exemplo, vídeos e animações. Igualmente, em contraste com as escolas e os centros de ciência, os conteúdos científicos na Internet podem ser consultados por qualquer pessoa, a

*Departamento de Engenharia Química, LEPAE, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, URL: <http://www.fe.up.pt/~vsilva>, E-mail: vsilva@fe.up.pt

qualquer hora, sem restrição de horários. No entanto, actualmente, em Portugal ainda existe uma preocupante escassez de conteúdos educativos na Internet.

Com o objectivo de tornar a Internet num meio com real valor pedagógico para o ensino das ciências Química e Física, o sítio de Internet "Ciência em Casa" (<http://cienciaemcasa.cienciaviva.pt>) surge como um complemento aos meios tradicionais de ensino da ciência em Portugal [12]. A principal vertente do sítio em questão é a divulgação de experiências simples que ilustram conceitos científicos importantes como, por exemplo, a pressão e a densidade.

2. Desvendar a ciência em casa

O desconhecimento do facto de todo o conhecimento científico ter as suas raízes em observações simples pela maior parte das pessoas, faz com que estas observem os acontecimentos do seu dia-a-dia sem qualquer base científica [5]. A aventura da ciência acontece praticamente durante todo o dia, mas a maioria não a sabe desvendar e entender. Muitas pessoas desconhecem que a maior parte dos conceitos científicos podem ser ilustrados/verificados com matérias de uso corrente e que, desta forma, a ciência para além de acontecer nas escolas e nos centros de ciência pode acontecer em casa, com sistemas fáceis de implementar.

A Química e a Física são excelentes exemplos de ciências intimamente ligadas à vida real, estando presentes praticamente em todas as actividades humanas [3]. Diversas actividades quotidianas que envolvem diferentes materiais, formas, suas composições, estruturas, propriedades e reacções podem facilmente ilustrar estas ciências. O contacto íntimo (tocar, sentir, cheirar, ver, etc.) com a ciência aproxima os experimentadores dos fenómenos em estudo, facilitando a sua compreensão através de analogias com o dia-a-dia [13]. Após a experimentação e verificação dos conceitos científicos, o experimentador passa a olhar o mundo de maneira diferente, a ver coisas que nunca viu e,

eventualmente, a fazer coisas que nunca fez porque achava que não era capaz [14].

Para além disso, a experimentação directa da ciência em casa envolve igualmente actos individuais de preparação e execução da actividade prática. Na actualidade, a maioria das actividades experimentais nas escolas envolvem materiais e protocolos previamente escolhidos e organizados pelo professor e o objectivo principal do aluno é a obtenção da resposta certa [13]. Em contraste, a experimentação da ciência em casa pode ser encarada como investigativa, onde o experimentador pode testar facilmente diversas teorias implementando sistemas de raiz. Desta forma, o trabalho experimental autónomo e de descoberta pode levar ao desenvolvimento de capacidades para a compreensão da natureza prática do trabalho científico. Mesmo tratando-se de actividades fáceis de implementar, demonstrativas e qualitativas, a criatividade e inovação do experimentador estão sempre presentes durante a sua execução, visto que os sistemas de experimentação não são restritos a uma determinada instalação. Por exemplo, o experimentador pode alterar o sistema para tornar o fenómeno mais perceptível, ou até, testar diferentes materiais ou aproximações.

Igualmente, a introdução de certos conceitos científicos importantes a partir de experiências lúdicas realizadas em casa, pode satisfazer as expectativas e curiosidades iniciais do experimentador pela Química ou Física. Logo à partida, este apresenta uma natural curiosidade e uma certa sensação de "suspense" pelo desenrolar e desenlace da actividade [3]. Com o envolvimento e participação activa do experimentador, as experiências tornam-se pessoais, motivadoras e interessantes. Deste modo, as expectativas iniciais pela Química e Física não saem defraudadas. Este facto contrasta com a desilusão, desinteresse e afastamento que o aluno sente quando nas aulas convencionais é realizada uma sistemática abordagem teórica de matérias fastidiosas e não é

feita a contextualização do conceito científico com o dia-a-dia [3].

Na actualidade, em Portugal, existem diversos livros de ciência divertida que podem ser adquiridos nas livrarias [4-10]. A maior parte dos livros apresentam diversas actividades experimentais exploratórias interessantes para todos os curiosos em ciência. No entanto, na maior parte das vezes o público alvo dos livros em questão são alunos do ensino básico e secundário. Os materiais envolvidos são geralmente de uso quotidiano e de fácil aquisição. Os diferentes livros primam pela abordagem simples dos conceitos teóricos e pela estratégia de tornar a ciência divertida e atraente. Estes apresentam as actividades experimentais estruturadas segundo temas bem definidos, tornando por isso a sua consulta fácil e rápida. No entanto, as potencialidades pedagógicas deste meio de ensino ainda não estão totalmente exploradas, visto que, sendo um meio de divulgação impresso, este apresenta a particularidade de proporcionar pouca interactividade (elevada energia de activação), impossibilidade de aprofundamento de conhecimentos e de ser difícil o contacto leitor/autor para a discussão de aspectos relacionados com as actividades ou fenómenos envolvidos.

3. Internet versus livros na divulgação da ciência

O aumento da popularidade da Internet e das tecnologias multimédia está a resultar no desenvolvimento de novas estratégias para o ensino e aprendizagem da ciência [15]. A Internet como meio de divulgação científica apresenta diversas vantagens relativamente aos livros. Primeiro, os materiais impressos requerem períodos de desenvolvimento longos, mas quando publicados são estáticos e rapidamente ultrapassados [16]. Este facto contrasta com a dinâmica associada à Internet. Qualquer sítio pode ser actualizado em fracções de segundo e manter o leitor sempre interessado por novos conteúdos.

Segundo, na tentativa de apresentar o máximo de informação e de abranger a maior audiência possível, os autores e

editores criam textos generalistas que os leitores têm de estudar exaustivamente para retirar o que lhes interessa [16]. Ao nível da Internet, os conteúdos podem ser melhor distribuídos e seleccionados para cada determinado tipo de leitor alvo. A selectividade do conteúdo apresentado pode ser muito maior.

A terceira limitação dos conteúdos impressos é o facto de estarem limitados a formatos bidimensionais [16]. Em contraste, a Internet disponibiliza uma grande variedade de conteúdos visuais e auditivos, possibilitando aos visitantes a aprendizagem dos conceitos de uma forma mais concreta e motivante. Diversas formas de aprendizagem podem ser estimuladas através da utilização de texto associado a conteúdos áudio, visuais, gráficos e elementos dinâmicos [11]. Os leitores podem assim aprender os fenómenos científicos de uma maneira abstracta e ver a sua aplicação concreta através de animações ou vídeos.

Por fim, a quarta e mais importante limitação dos conteúdos impressos é a sua falta de interactividade [16]. O contacto autor/leitor é complicado e a discussão ou aprofundamento de assuntos relacionados com a publicação é praticamente impossível. Em contraste, a Internet possibilita a ligação a informações adicionais disponíveis noutros sítios de Internet, discussão em fóruns e clarificação de dúvidas directamente com o autor. Ainda mais importante é o facto do próprio visitante poder participar no conteúdo do sítio [16].

4. O sítio "Ciência em Casa"

O sítio "Ciência em Casa" foi publicado na Internet no ano de 1999 por um estudante de Engenharia Química (agora estudante de doutoramento) no Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto [12].

O principal objectivo deste sítio é o de divulgar a Química e Física de uma forma simples e divertida, tirando partido das potencialidades que a Internet disponibiliza. Em contraste com os livros de ciência divertida existentes no mercado, o conteúdo do sítio em questão

aposta na interactividade, design gráfico atraente, actualização permanente, utilização de conteúdos multimédia e, principalmente, tornar o sítio do visitante e não somente do autor. O público alvo do sítio são professores, alunos e pessoas leigas que tenham curiosidade acerca das ciências Química e Física que acontecem no dia-a-dia [12].

O coração do sítio são as experiências científicas que podem ser executadas em casa com materiais de fácil aquisição [12]. Todas as experiências propostas envolvem baixos níveis de perigosidade e custo. No presente, o "Ciência em Casa" apresenta 49 experiências, abordando diversos temas, desde os estados físicos da matéria até à electroquímica.

Para além de propor demonstrações científicas simples, o sítio "Ciência em Casa" contém igualmente outros conteúdos que têm por objectivo complementar o coração do sítio (experiências). Os conteúdos com maior relevância são o concurso bimestral "Ciência em Casa" e o espaço "Eureka!".

O concurso "Ciência em Casa" tem como objectivo cultivar a participação dos visitantes no conteúdo do sítio, através da aplicação dos seus conhecimentos científicos para resolver desafios lançados pelo autor. Até ao momento todos os concursos publicados obtiveram respostas, sendo por vezes complicado escolher a vencedora. É de notar que o concurso não tem qualquer prémio monetário ou material. Ao vencedor do concurso somente é assegurada a publicação da resposta numa página específica para o efeito com o seu nome.

Por sua vez, o espaço "Eureka!" é reservado às dúvidas que os visitantes podem colocar no sítio para serem respondidas por outros visitantes. Este espaço funciona à semelhança da famosa secção "The last word" do *New Scientist* [17].

Relativamente a outros conteúdos adicionais, estes apresentam informação útil para o cientista caseiro. Neste grupo estão inseridas as secções do glossário de definições científicas, "Questionarium" onde o visitante pode examinar os

seus conhecimentos e, entre outros, as regras de segurança para a execução das actividades experimentais.

Recentemente, o sítio "Ciência em Casa" passou a ser alojado no directório do "Ciência Viva" (<http://cienciaemcasa.cienciaviva.pt>) e, igualmente, foi publicada a versão em inglês.

5. Conclusões

Para o futuro de Portugal é prioritário que a sociedade desperte para a ciência. É essencial que, pelo menos, as novas gerações adquiram uma cultura científica e tecnológica mais sólida e com mais significado nas suas vidas.

Funcionando como um complemento educativo, a realização de actividades experimentais simples em casa pode tornar a ciência mais interessante e não defraudar o interesse natural das pessoas pela Química ou Física. As experiências designadas por exploratórias (com recurso a material de uso quotidiano), rápidas e qualitativas permitem a experimentação directa e a contextualização dos fenómenos científicos, aproximando desta forma os experimentadores da sua compreensão.

Utilizando as potencialidades da Internet para a divulgação da ciência, o "Ciência em Casa" surge como uma fonte de conteúdos pedagógicos úteis para professores, alunos e curiosos. Neste sítio, os visitantes podem consultar diversas demonstrações experimentais simples que ilustram qualitativamente conceitos científicos importantes. Para além disso, o "Ciência em Casa" apresenta conteúdo adicional que realça o aspecto lúdico e divertido das ciências Química e Física.

Agradecimentos

Agradeço ao claustro de professores do Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto pela formação científica e pessoal que me transmitiram.

Igualmente, agradeço ao "Ciência Viva" o apoio permanente na divulgação do "Ciência em Casa" e o facto de disponibilizarem espaço no servidor para o seu alojamento.

Agradeço ao Professor Adélio Mendes pela sua amizade e orientação. Por fim, agradeço ao Professor Duarte Costa Pereira pelo incentivo para a publicação da presente comunicação.

Bibliografia

- [1] Galvão, C., "Todos queremos um ensino das ciências melhor", Química (Boletim da Sociedade Portuguesa de Química), 84, 2002.
- [2] <http://www.cienciaviva.pt> – Ciência Viva.
- [3] Dias, J., "O ensino experimental em Química", Comunicar Ciência, 1, 1998.
- [4] Ehrlich, R., "Virar o mundo do avesso", Coleção Aprender, Fazer Ciência, Gradiva, 1992.
- [5] Bohren, C. F., "Nuvens numa Caneca de Cerveja – Experiências simples em física atmosférica", Coleção Aprender, Fazer Ciência, Gradiva, 1996.
- [6] VanCleave, J., "Química para Jovens", Publicações Dom Quixote, 1998.
- [7] Hann, J., "Como funciona a Ciência", Selecções Reader's Digest, 1991.
- [8] Walker, J., "O Grande Circo da Física", 2.ª edição, Coleção Aprender, Fazer Ciência, Gradiva, 2001.
- [9] VanCleave, J., "Física para Jovens", 2.ª edição, Publicações Dom Quixote, 2000.
- [10] Fiolhais, C., "Física Divertida", Coleção Aprender, Fazer Ciência, Gradiva, 1999.
- [11] Bates, T., "Teaching, learning and the impact of multimedia technologies", Educuse, September/October, 2000.
- [12] Silva, V., "Sítio 'Ciência em Casa' – Tecnologias da informação aplicadas à divulgação das ciências Química e Física", Ingenium (Revista da Ordem dos Engenheiros), 2.ª série, 76, Junho 2003.
- [13] Almeida, A., "Papel do trabalho experimental na educação das ciências", Comunicar Ciência, 1, 1998.
- [14] Lourenço, F., "Que ganhamos hoje em levar os nossos alunos a um museu?", Comunicar Ciência, 3, 1998.
- [15] Bollentin, W. R., "Can information technology improve education?", Educom, 33, 1, 1998.
- [16] Marion, A. e Hacking, E. H., "Educational Publishing and the World Wide Web", Journal of Interactive Media in Education, 98, 2, 1998.
- [17] New Scientist, "Os Porquês dos Quês", Coleção Aprender, Fazer Ciência, Gradiva, 2001.



APCER
Certificado
de Conformidade

Setor
Edifício Prometeia
P.O. Box 50000 27-110, Lda 204
1700-012 LISBOA Portugal
Tel. 351 21 507 99 99
Fax. 351 21 507 99 99

Certificate of Registration

NÚMERO/Number **96/CEP.410**

A Associação Portuguesa de Certificação (APCER)
The Portuguese Association for Certification (APCER)
certifica que o sistema da qualidade da
certifies that the quality system of

SOQUÍMICA – SOCIEDADE DE REPRESENTAÇÕES DE QUÍMICA, LDA.
Rua Coronel Santos Pedroso, 15
1500 - 207 LISBOA
PORTUGAL

Implementado na comercialização, manutenção e calibração de equipamentos de laboratório, cumpre os requisitos da
implemented in the supply, servicing and calibration of laboratory equipments, meets the requirements of

NP EN ISO 9002:1995

Sistemas da Qualidade. Modelo de garantia da qualidade na produção, instalação e assistência após-venda.
Quality Systems. Model for quality assurance in production, installation and servicing.

O presente certificado é emitido no âmbito do Sistema Português da Qualidade.
This certificate is issued within the Portuguese System for Quality

Data de emissão/date of issue: 1999-06-18 Válido até/valid until: 2002-06-17

Luis Fonseca
Director Geral/General Director



SOQUÍMICA

Sociedade de Representações de Química, Lda

R. Coronel Santos Pedroso 15 · 1500-207 Lisboa **Tel 21 716 5160 · Fax 21 716 5169**

R. 5 de Outubro 269 · 4100-175 Porto **Tel 22 609 3069 · Fax 22 600 0834**

E-mail: soquimica@mail.telepac.pt

www.soquimica.pt

Trabalhamos pela sua segurança...



para garantir a sua **integridade**

Especialistas em planificação,
integração e instalação de
laboratórios

Estamos onde
você quer, que
estejamos ...



www.burdinola.com burdinola@burdinola.com

The whole world of

CHEMISTRY

Chemistry – A European Journal is the fastest growing international forum for the publication of the most innovative full papers from all areas of chemistry and its related fields.

Its success has come from attracting first-rate full papers from international top authors together with great features such as "Concepts", which provide a useful insight to new areas of chemistry and new angles on familiar problems.

Chemistry – A European Journal is a collaboration of 14 national chemical societies.

A comparison of the page prices and Impact Factors of similar journals underlines that *Chemistry – A European Journal* gives you excellent value for money. This journal belongs in every chemistry library.

every two weeks

2002 Volume 8
24 issues per year
ISSN Print 0947-6539
ISSN Electronic 1521-3756
www.wiley-vch.de/home/chemistry



The place to be in chemistry:

- The ISI measured Impact Factor is at 4.698
- Full-text online access through *Wiley InterScience* for subscribing institutions and members of the owner societies included in subscription rate
- *EarlyView*: Issues appear online prior to print distribution
- *Virtual Sample Copy*: FREE online access to full text of sample copy:
www.interscience.wiley.com

2002

Please send me a free sample copy

Please enter our/my 2002 subscription to:
Chemistry – A European Journal
at the institutional rate*:

	print	electronic
Europe	<input type="checkbox"/> € 1958	<input type="checkbox"/> € 1958
Switzerland	<input type="checkbox"/> SFr 3338	<input type="checkbox"/> SFr 3338
All other countries	<input type="checkbox"/> US\$2418	<input type="checkbox"/> US\$2418

* For a 5% premium, institutions can choose both print and electronic access.

for members of the owner societies from Austria, Belgium, Czech Republic, France, Germany, Greece, Hungary, Italy, The Netherlands, Poland, Portugal, Spain and Sweden at the personal rate:

	print
Europe	<input type="checkbox"/> € 168
Switzerland	<input type="checkbox"/> SFr 278
All other countries	<input type="checkbox"/> US\$258

Prices include postage and handling charges.

Please tick: home business

Name

Address

City/Postcode

Country

Membership-No.

Date/Signature

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

WILEY-VCH Customer Service
P.O. Box 10 11 61
69451 Weinheim, Germany
Phone: +49 (0) 6201-606 147
Fax: +49 (0) 6201-606 172

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

John Wiley & Sons, Inc.
605 Third Avenue • New York, NY 10158-0012, USA
Fax: +1 212-850 6088

 WILEY-VCH