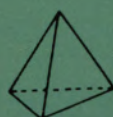


QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Fogo



Ar



Água



Terra



Bicentenário de Lavoisier

QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Orientação Editorial

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

Química publica entrevistas, reportagens, artigos solicitados e propostos, noticiário, resenhas de livros e outras publicações e correspondência dos leitores.

Nenhum texto será considerado a priori inaceitável, mas é dada preferência a artigos de carácter relativamente geral e escritos de modo a poderem interessar a um vasto leque de leitores.

Normas de colaboração

1. Enviar três exemplares, dactilografados a dois espaços, com as páginas numeradas e em formato A4, endereçados a: Director de *Química*, Boletim da SPQ, Avenida da República, 37-4.º, 1000 Lisboa. Não enviar os originais das eventuais ilustrações.

2. A Redacção acusará a recepção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores.

Com base nas apreciações obtidas, a Direcção decidirá da aceitação ou recusa das colaborações propostas.

Eventualmente, proporá aos autores a reelaboração dos textos antes de tomar uma decisão definitiva.

3. Os artigos devem conter um resumo de 50 a 100 palavras com a descrição do respectivo conteúdo. Salvo casos excepcionais, os textos não devem exceder 15 páginas A4.

Os autores deverão sugerir e apresentar ilustrações para os seus textos, até ao máximo de seis por

artigo. As fórmulas complexas, os esquemas, etc. deverão ser preparados como ilustrações mas não estão incluídos no número limite anterior.

As ilustrações deverão ter a qualidade indispensável a uma boa reprodução gráfica, devendo ser acompanhadas de legendas.

4. Os artigos devem seguir, tanto quanto possível, as recomendações da IUPAC quanto à nomenclatura e unidades.

5. Na Bibliografia, a indicação abreviada de artigos em publicações periódicas deve obedecer à convenção autores-volume-ano-página, por exemplo W. Krätschmer, L.O. Lamb, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman, *Nature* **347** (1990) 354. A indicação de livros deverá seguir a convenção autor/editor-título-editora-ano, por exemplo S.J. Formosinho, I.G. Czismadia, L. G. Arnaut (Editores), *Computational and Theoretical Models for Organic Chemistry*, Kluwer, 1991.

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

7. No caso de os autores desejarem corrigir pessoalmente as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente no momento em que os enviem para a Redacção.

8. Após a aceitação da colaboração, será solicitado o envio da mesma em disquete. Embora não obrigatório, este meio permite um processamento mais fácil e mais rápido do texto.

9. A não observância de qualquer das normas de colaboração poderá levar à devolução do texto recebido.

QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Propriedade de:
Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870-1180
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 52 - Janeiro-Março 1994

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

Director
Mário Nuno M.S. Berberan e Santos

Director-Adjunto
Herminio Diogo

Redactora
Helena Pais Costa

Direcção Gráfica
Luís Moreira

Secretária de Redacção
Cristina Campos

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

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

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

Tratamento de texto
Cristina Cardoso

Execução Gráfica
JM3
Alto do Colaride
Zona Industrial do Cacém
Lote 0 - Cave Esq.
2735 CACÉM

Tiragem: 3800 exemplares

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

Distribuição gratuita aos sócios da SPQ

Distribuição para as Escolas Oficiais a cargo do Departamento de Educação Básica do Ministério da Educação

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

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

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

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

Na capa:

Os quatro elementos de Platão e Gasómetro (1787), usado por Lavoisier na experiência da síntese da água (Musée National des Techniques, Paris)
Este e outro gasómetro idêntico custaram a Lavoisier o equivalente a cerca de 45.000 contos actuais, isto é, quase metade do que se supõe terem sido os seus rendimentos anuais.

	2	notícias
	5	notícias SPQ
	10	notícias IUPAC
A visibilidade da heterodoxia científica	13	opinião
SEBASTIÃO J. FORMOSINHO		
Da Transmutabilidade e Simplicidade da Água	16	bicentenário
A. M. AMORIM DA COSTA		
A Comunicação Científica entre João Jacinto de Magalhães e Antoine-Laurent Lavoisier	24	
ISABEL M. MALAQUIAS		
Alguns aspectos químicos do odor	30	artigos
FERNANDO M.C. PEIXOTO		
O Poliedro de Euler e as Fases de Gibbs	34	
LIONELLO POGLIANI		
	36	qualidade
A passagem da corrente eléctrica num condutor electrolítico	41	ensino
VÍCTOR M. M. LOBO		
Espectroscopia de Absorção no Ultravioleta e Visível	44	técnicas experimentais
J. M. G. MARTINHO		
	50	novos produtos
Dos éteres-coroa à terapia do cancro	54	moléculas
RITA DELGADO		
O Clube de Software da SPQ - I	59	publicações
JOÃO PAULO LEAL		

1994 Bicentenário de Lavoisier



Antoine-Laurent Lavoisier foi guilhotinado em Paris em 8 de Maio de 1794, celebrando-se pois em 1994 o bicentenário da sua morte. Em 1989 fora já assinalado o bicentenário do "Traité Élémentaire de Chimie", e em 1993 algumas iniciativas recordaram os 250 anos do seu nascimento. No entanto, a tendência para os "números redondos" (em base 10) e as circunstâncias dramáticas da morte de Lavoisier, justificam a escolha de 1994 para ano das comemorações maiores, à semelhança do suce-

didado há um século (1894).

Refira-se, como curiosidade, que a Academia das Ciências de Lisboa celebrou solenemente o bicentenário do nascimento de Lavoisier, numa altura (1943) em que Paris se encontrava sob ocupação, e havia notícias (verdadeiras) de a estátua de Lavoisier erguida na Place de la Madeleine (em 1900, na sequência do centenário) ter sido fundida pelos alemães para fins bélicos.

As presentes comemorações estarão naturalmente centradas em França, com organização da respectiva Academia das Ciências, da qual Lavoisier foi membro destacado. Também na Universidade de Cornell (EUA), onde desde os anos 60 se conserva uma importante coleção de manuscritos daquele químico, se evocará Lavoisier de forma especial.

Em 1943, a solenização do duplo centenário do nascimento era justificada com uma citação de Júlio Dantas: "Eu entendo que deviam comemorar-se os centenários do nascimento dos grandes homens, de preferência aos do seu óbito. Os primeiros são jubileus; os segundos são exéquias". Fá-lo-á, talvez, quem for vivo em 2043!

The Chemical Intelligencer

We are starting this informative and entertaining magazine for all chemists, published by Springer International (New York).

Aims and Scope

The *Chemical Intelligencer* publishes articles about chemistry, about chemists, and about the history and culture of chemistry. Articles should inform and entertain a broad audience of chemists, including those who are not specialists in the subject of the article. Articles might discuss a current direction, new discoveries, experiments or models, new trends or history, the image of and opportunities in chemistry, philosophy or education, applications and many other subjects. The *Chemical Intelligencer* encourages authors to write in a related, expository style and to include pictures and other graphics with articles. Intermingling opinion, chemistry, and historical comments is encouraged to make lively reading. Humor and controversy are welcome. In addition to longer articles, there is a Letters section and sections for short articles such as the Chemical Tourist, New Experiments, The Image of Chemistry, New Products, Book

Reviews, Stamp Corner, The Cooking Chemist, and others may be developed.

The *Chemical Intelligencer* is inspired in some ways by another Springer publication *The Mathematical Intelligencer*, now in its 15th Volume (If your Library has it, please have a look at it; I have followed it for years and found it instructive and entertaining.)

I would like to stress that **this publication is not another new scientific journal** of which we have so many around but a **lighter, informative, and entertaining magazine**, cutting through all specializations and aspiring to serve the entire international chemistry community. Four issues per year are planned and a favorable pricing would make this magazine affordable not only to departments and libraries but many individuals as well.

According to our schedule, the first issue will be appearing in January, 1995. Thus I am starting the collection of material for the first issues, and I am cordially inviting you to submit manuscripts for the first issues.

István Hargittai

Professor of Chemistry
Editor-in-Chief
The Chemical Intelligencer
Institute of General and
Analytical Chemistry
Budapest Technical University
Budapest XI, Szt. Gellért tér 4
H-1512 - Hungria

Ensino das Ciências e Formação de Professores - Projecto MUTARE



O projecto de investigação-ação "Ensino das Ciências e Mudança Conceptual: estratégias inovadoras de formação de professores", vulgo Projecto MUTARE,

sediado na Universidade de Aveiro, tem como principal objectivo propôr, avaliar e divulgar, no âmbito do ensino, estratégias inovadoras do ensino das Ciências, tendo em vista a mudança conceptual dos alunos (ensinos básico e secundário).

Deste projecto, financiado pelo Instituto de Inovação Educacional e pela JNICT, fazem já parte oito investigadores e, para o desenvolvimento dos seus traba-

lhos, nomeadamente no que toca a novas estratégias de ensino, assegurou-se igualmente a colaboração de vários colegas dos ensinos básico e secundário (Física/Química e Biologia/Geologia), entre outros contributos específicos.

É neste contexto que se justifica a publicação, com coordenação do prof. Francisco Cachapuz, da Universidade de Aveiro, dos resultados dos traba-

lhos de investigação levados a cabo no âmbito do projecto, contribuindo-se desta forma para a sua difusão e para o próprio processo de formação dos professores de Ciências. Os interessados na publicação, composta por dois volumes ao preço unitário de 500\$00, poderão pedi-la contactando a secção Autónoma de Didáctica e Tecnologia Educativa, Universidade de Aveiro, 3800 Aveiro.

“Advanced Research Institute” da NATO sobre Transferência de Electrões

Realizou-se de 5 a 11 de Setembro, num hotel do Algarve, um “Advanced Research Institute” da OTAN, subordinado ao tema “Photoinduced Electron-Transfer Reactions”. Esta reunião, dirigida pelo Dr. Luís Arnaut, da Universidade de Coimbra, e co-patrocinada pela Sociedade Portuguesa de Química, reuniu os melhores especialistas do mundo neste domínio.

A lição de abertura foi proferida pelo Prof. R. Marcus, Prémio Nobel da Química em 1992. Seguiram-se 35 lições proferidas por igual número de oradores, americanos e europeus, sendo uma delas dada pelo Prof. S.J. Formosinho, da Universidade de Coimbra, e outra pela Prof^a Sílvia Costa, do Instituto Superior Técnico.

O número de participantes foi restrito a 45, entre os quais seis portugueses. Dado o elevado nível científico atingido, o *Journal of Photochemistry and Photobiology* aceitou publicar um número especial contendo algumas lições seleccionadas.

Como balanço do encontro, os participantes foram unânimes em considerar esta reunião como a mais marcante já realizada no domínio da transferência electrónica, dada a conjugação entre a qualidade das lições e o momento que se vive, no qual a transferência electrónica é considerada um dos domínios da Química com mais potencial de desenvolvimento científico e técnico.

L. Arnaut

Biosensors for Food Analysis

11-12 de Abril de 1994
Universidade de Leeds

Organizado pelo grupo de Química Alimentar da RSC, realiza-se em Leeds um simpósio sobre biosensores na análise alimentar. Neste simpósio serão discutidos os últimos progressos em biosensores com relevância para a análise alimentar.

Para mais informações contactar:

Dr. Andrew Scott, Biosensors for Food Analysis 94, Technical Development, Lyons Tetley Ltd, 325/347 Oldfield Lane North, Greenford, Middx., UB6 OAZ, Fax 44-81-566-6460.

Colóquio «Sociedade, Ciência e Valores — Que Desenvolvimento?»

Aferir o progresso em termos exclusivamente económicos gera equívocos de bem-estar e efeitos de ilusão. Defender que cientistas e técnicos nada têm a ver com estas questões é retirar-lhes liberdade e responsabilidade. Por isso, precisamos de reflectir e fazer opções, pois só assim contribuiremos conscientemente para um desenvolvimento com qualidade de vida e de onde os valores não se ausentaram.

No sentido de divulgar e alargar a reflexão sobre Ciências, Técnicas e Valores, iniciada nos números da Revista de Ciência, Tecnologia e Sociedade de 1993, a Associação de Ciência e Tecno-

logia para o Desenvolvimento e o Grupo Ciências, Técnicas e Valores organizou um colóquio, na Fundação Calouste Gulbenkian, de 28 de Fevereiro a 1 de Março. Neste colóquio, foram abordados temas como o conceito de valor numa perspectiva histórica e disciplinar, a Ciência e a guerra e a Ciência e a saúde.

Toda a correspondência deve ser dirigida para a Comissão Organizadora, a/c Prof^a Doutora Ana Luísa Janeira, Faculdade de Ciências de Lisboa, Departamento de Química, Bloco C1, 5º andar, Rua Ernesto de Vasconcelos, 1700 Lisboa, fax 01. 7599404.

European Science Foundation Programme

“The Evolution of Chemistry in Europe (1789-1939)”

A European Science Foundation decidiu criar um programa tendente a contribuir para que o conhecimento da Química, no seu passado, sirva para revigorá-la no presente. Neste contexto, a comissão dinamizadora, composta por pessoas de onze países, entre as quais a Prof^a Doutora Ana Luísa Janeira, seleccionou, segundo uma perspectiva global, as situações, temas e problemas gerais, existindo quatro secções encarregues de organizar os “workshops”.

Parecendo importante que Portugal estivesse representado em cada uma das equipas, acordou-se na seguinte distribuição: “Communication: Finding a Language” - A.M. Nunes dos Santos, FCTUNL, “The Making of the Chemist: Social History of a Profession” - A.M. Amorim da Costa, FCTUC, “Strategies of Chemical Industrialisation” - J.P. Sousa Dias, FFUL, “Laboratories, Instruments and New Technologies” - A.L. Janeira, FCUL.

“O Presente e o Futuro da Água em Portugal”

Vai realizar-se em Abril, de 12 a 14, no centro de congressos da FIL, o II Congresso da Água, organizado pela Associação Portuguesa de Recursos Hídricos (APRH) e subordinado ao tema “O Presente e o Futuro da Água em Portugal”. Os temas a abordar serão:

A) Planeamento e Gestão Integra-

da de Recursos Hídricos;

B) “Caracterização, Previsão e Controlo Quantitativo de Recursos Hídricos Superficiais e Subterráneos”;

C) “Qualidade da Água, Controlo da Poluição e Ambiente”;

D) “Investigação, Ensino e Formação em Recursos Hídricos”.

Em paralelo, vai ter lugar o II Simpósio Luso-Brasileiro e Africano de Língua Oficial Portuguesa de Hidráulica e Recursos Hídricos, organizado pela APRH e pela Associação Brasileira de Recursos Hídricos, que contemplará ainda uma exposição técnica e documental de equipamentos e produtos

ligados ao tema, sendo para o efeito disponibilizado o aluguer de módulos. Os interessados em participar nesta exposição devem inscrever-se na APRH, INEC, Av. do Brasil 101, 1799 Lisboa Codex, tel. 01. 8482131, ext. 2428, fax 01. 8797660, onde poderão também obter o dossier técnico da exposição.

13ª Conferência Internacional sobre Educação Química

Vai realizar-se na Universidade Interamericana de S. Juan, Porto Rico, de 8 a 13 de Agosto, a 13ª Conferência sobre Educação Química, subordinada ao tema "Química - A Chave para o Futuro".

O objectivo deste evento é pôr em contacto professores de Química, do ensino secundário e universitário, a fim de que estes partilhem as suas experiências e se encontrem novos métodos e formas inovadoras do ensino desta ciência.

Os trabalhos decorrerão em sessões plenárias e específicas,

simpósios, "workshops", painéis e exposições e irão abordar temas como o desenvolvimento curricular, o ensino criativo, os materiais e equipamentos para o ensino, o futuro do ambiente, a formação profissional dos professores e a Química no século XXI.

Mais esclarecimentos poderão ser obtidos com Prof. Dr. Ramon de la Cuétara, Universidade Interamericana, Divisão de Ciência e Tecnologia, P.O. Box 191293, San Juan, PR 00919 - 1293, tel. 00.809. 2508379, fax. 00.809. 7652055/ 2500782.

III Congresso Internacional de Química da ANQUE



A Associação Nacional de Químicos de Espanha (ANQUE) está a organizar o seu III Congresso, que irá ter lugar em Puerto de la Cruz, Tenerife, Ilhas Canárias, de 5 a 7 de Dezembro de 1994.

Subordinado ao tema "Resíduos Sólidos e Líquidos - o seu melhor destino", o encontro pretende abordar o impacto técnico, económico e ambiental deste problema, numa perspectiva integrada e multidisciplinar que vai desde a criação dos resíduos até ao seu transporte, armazenamento, gestão, reciclagem e destruição, contando para tal com a presença de técnicos, investigadores, professores, gestores e industriais.

O congresso será dividido em seis secções, dedicadas a Resíduos Urbanos, Agrícolas, Animais e Florestais, Industriais e Mineiros, Tóxicos, Perigosos e Hospitalares e, por último, os Radioactivos, dedicando-se ainda uma das secções a normas, legislação e patentes, sendo os temas tratados em conferências plenárias e mesas redondas.

As línguas oficiais do congresso serão o castelhano e o inglês, e o seu programa preliminar será distribuído no decurso do primeiro trimestre deste ano. Para mais informações, os interessados poderão contactar o secretariado do congresso, C. Lagasca, 85, 28006 Madrid, tel. 00. 34.1. 4310703, fax 00.34.1. 5765279.

EUROCHEMIST

Abertura de candidaturas ao título de Químico Europeu

A Sociedade Portuguesa de Química recebe até ao dia 15 de Abril candidaturas ao título de "Eurochemist".

Há actualmente os seguintes euroquímicos:

Bélgica (20), Dinamarca (2), França (2), Irlanda (13), Itália (6), Holanda (17), Portugal (3), Espanha (46) e Reino Unido (117).

Podem solicitar este título:

1) Sócios da SPQ.

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

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

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

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

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

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

J. Lopes da Silva
Presidente do Júri Nacional

1º Simpósio Internacional de Neuroelectroquímica Coimbra 5-6 de Setembro de 1994

Realiza-se na Universidade de Coimbra, em 5 e 6 de Setembro próximos, o primeiro simpósio sobre neuroelectroquímica. Tem por objectivo reunir os investigadores de Bioelectroquímica e Electrofisiologia de sistemas neuronais. Serão cobertos os progressos mais recentes no estudo,

controle e observação de fenómenos neurológicos *in vivo* através de micro e nano tecnologia electroquímica. Para mais informações contactar Prof.ª Dr.ª Ana Maria Oliveira Brett, Dep. de Química, Univ. de Coimbra, 3049 Coimbra, Tel. (039) 22826, Telefax (39) 27703.



XIV ENCONTRO NACIONAL DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

5 A 8 DE ABRIL DE 1994 - UNIVERSIDADE DE AVEIRO - AVEIRO



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

universidade de aveiro



5 de Abril

QUÍMICA DO AMBIENTE

8.00 - 9.00h — Inscrições e entrega da documentação.
9.00h — Abertura
9.30 - 10.30h — Lição Plenária — T. Edmonds, Loughborough: "Applications of Chemical Sensors for Environmental Monitoring".
10.30 - 11.00h — Café
11.00 - 12.00h — Lição Plenária — G. Millward, Plymouth: "Trace Metal Reactivity in Estuaries and Coastal Waters"
12.00 - 13.00h — Micros-simpósios: Oceanografia Química; Química das Águas Naturais; Tratamento de Águas.
13.00 - 14.30h — Almoço
14.30 - 16.00h — Posters
16.00 - 16.30h Café
16.30 - 17.30h — Lição Plenária — R. Allen, Virgínia (USA): "Hazardous Waste Management"
17.30 - 18.30h — Lição Geral — Casimiro A. Pio, U. Aveiro: "Química da Atmosfera"

Recepção — Porto de Honra

6 de Abril

QUÍMICA, EDUCAÇÃO E SOCIEDADE

9.00 - 10.00h — Lição Plenária — A. F. Cachapuz, U. Aveiro: "Da Inovação no Ensino da Química: Contributos da Investigação Didáctica"
10.00 - 11.00h — Lição Plenária — A. Nunes dos Santos, UNL: "Lavoisier e a Química Inorgânica Contemporânea: Primórdios e Legado"
11.00 - 11.30h — Café
11.30 - 12.30h — Micros-simpósios: Métodos Instrumentais Avançados; Ensino de Química; Química e os Seres Vivos.
12.30 - 14.00h — Almoço
14.00 - 16.00h — Posters
16.00 - 16.30h — Café
16.30 - 17.30h — Lição Plenária — Vitor P. Crespo, U. Coimbra: "O Ensino Superior Face aos Novos Desafios à Sociedade Portuguesa"
17.30 - 18.30h Lição Geral — C. Fiolhais, U. Coimbra: (Título por definir)
20.00h — Assembleia Geral da SPQ

7 de Abril

QUÍMICA DOS PRODUTOS NATURAIS

9.00 - 10.00h — Lição Plenária — K. Hostettmann, Lausanne: "Strategy in the Search for New Bioactive Natural Products"
10.00 - 11.00h — Lição Plenária — R. Bonnett, Londres: "Natural and Synthetic Porphyrins and Chlorins for Photodynamic Therapy (PDT)"
11.00 - 11.30h — Café
11.30 - 12.30h — Micros-simpósios: Agromateriais, Produtos Naturais e Aplicações, Síntese de Produtos: Potenciais e Aplicações Industriais.
12.30 - 14.00h — Almoço
14.00 - 16.00h — Posters
16.00 - 16.30h — Café
16.30 - 17.30h — Lição Plenária — A.D. Webb, Davis (USA): "Chemistry of Wines as Foods"
17.30 - 18.30h — Lição Geral — P.B. Correia, Herbex: "Comportamento Biológico de Herbicidas Agrícolas"
Jantar do Encontro

8 de Abril

QUÍMICA DE MATERIAIS E DA CONVERSÃO DE ENERGIA

9.00 - 10.00h — Lição Plenária — D. Braga, Bolonha: "Molecular Organization in Crystalline Organometallic Materials"
10.00 - 11.00h — Lição Plenária — M. Armand, Grenoble: "Les Polymères Conducteurs Ioniques et les Polymères Electroniques, Applications dans le Domaine du Stockage de l'Energie"
11.00 - 11.30h — Café
11.30 - 12.30h — Micros-simpósios: Electroquímica; Catálise e Materiais Microporosos; Fotoquímica e Química do Estado Sólido.
12.30 - 14.00h — Almoço
14.00 - 16.00h — Posters
16.00 - 16.30h — Café
16.30 - 17.30h — Lição Plenária — H. Burrows, U. Coimbra: "Reactividade do Estado Excitado do Ião Uranilo"
17.30 - 18.30h — Lição Geral — J. M. Peixoto Cabral, INETI. (título por definir)



ELEIÇÕES NA SPQ

1. Calendário

Em Janeiro de 1995 terminará o mandato dos actuais elementos da Mesa da Assembleia Geral, do Conselho Fiscal e do Conselho Executivo (Secretário-Geral, Secretários-Gerais Adjuntos e Tesoureiro) da SPQ; em Junho do mesmo ano terminará o mandato dos actuais Presidente e Vice-Presidente da SPQ. O Conselho Directivo da Sociedade considerou conveniente antecipar para Abril de 1994 as eleições previstas para todos estes órgãos. Esta antecipação tem como objectivo principal assegurar um período de sobreposição entre o actual e o próximo Conselho Executivo da SPQ (este será assim eleito em Abril, mas só entrará em funções em Janeiro de 1995). Os novos mandatos do Presidente e do Vice-Presidente deverão iniciar-se em Junho de 1995, mas a decisão do Conselho Directivo da Sociedade é a de "acertar o calendário" de eleições e de início de funções de todos os órgãos nacionais da SPQ. Em resumo, o calendário das eleições e do início de funções dos vários órgãos é o seguinte:

Abril de 1994 — Eleição da Mesa da Assembleia Geral, do Conselho Fiscal, do Conselho Executivo, do Presidente e do Vice-Presidente da SPQ.
Janeiro de 1995 — Início de funções dos órgãos eleitos.

As eleições para novos mandatos dos Presidentes das Delegações de Aveiro, Braga, Coimbra, Lisboa e Porto serão realizadas em meados de 1995.

2. Candidaturas

De acordo com o artigo 35.º, parágrafo 3.º, dos Estatutos, o Conselho Directivo da Sociedade enviou à Mesa da Assembleia Geral as seguintes duas listas de candidaturas para a eleição de Abril de 1994:

Lista de candidatas a *Presidente e Vice-Presidente*:

Doutor Sebastião José Formosinho Sanches Simões, FCTUC (*Presidente*)
Doutor José Dias Lopes da Silva, IST-UTL (*Vice-Presidente*)

Lista de Candidatos à *Mesa da Assembleia Geral, Conselho Fiscal e Conselho Executivo*:

Mesa da Assembleia Geral

Doutora Maria Alzira Bessa Almoester Moura Ferreira, FCUL (*Presidente*)
Doutor António José Venâncio Ferrer Correia, UA (*1.º Secretário*)
Doutora Fernanda Madalena de Abreu da Costa, FCUL (*2.º Secretário*)

Conselho Fiscal

Doutor António de Campos Pires de Matos, ICEN (*Presidente*)
Doutor João Paulo Arriegas Estevão Correia Leal, ICEN (*Secretário*)
Doutora Maria Agostinha Ribeiro de Matos, FCUP (*Relator*)

Conselho Executivo

Doutor José Manuel Gaspar Martinho, IST-UTL (*Secretário-Geral*)
Doutor Mário Nuno de Matos Sequeira Berberan e Santos, IST-UTL (*Secretário-Geral Adjunto*)
Eng. António Gonçalves da Silva, Colgate-Palmolive (*Secretário-Geral Adjunto*)
Doutora Laura Maria de Ramos da Costa Ilharco Almeida Santos, IST-UTL (*Tesoureira*)

Nos termos do artigo 35.º dos Estatutos, parágrafo 3.º, a Mesa da Assembleia Geral aceita outras candidaturas até 30 dias antes da data da Assembleia Geral.

3. Votação

A Mesa da Assembleia Geral divulgará todas as candidaturas propostas pelos sócios durante os 15 dias que antecedem a Assembleia Geral e enviará boletins de voto para que se possa exercer o voto por correspondência (artigo 33.º).

4. Convocatória

Nos termos do artigo 29.º dos Estatutos, convoco uma Assembleia Geral da Sociedade Portuguesa de Química para o dia 6 de Abril de 1994, às 20 horas, na Universidade de Aveiro (anfiteatro do CIFOP), com a seguinte ordem de trabalhos:

1. Informações e balanço das actividades da SPQ.
2. Relatório financeiro do biénio 1992-93 e situação financeira actual.
3. Eleição do Presidente e do Vice-Presidente da SPQ para o triénio 1995-1997.
4. Eleição da Mesa da Assembleia Geral, do Conselho Fiscal e do Conselho Executivo para o triénio 1995-1997.

Lisboa, 4 de Fevereiro de 1994.
A Presidente da Mesa da Assembleia Geral
Doutora Maria Alzira Almoester Ferreira

Representantes nacionais na FECS

(Federation of European Chemical Societies)

Coordenadora do "Grupo FECS" da SPQ

Prof. Maria José Calhorda
Departamento de Engenharia Química
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Chemistry and the Environment

Prof. Luísa M. Abrantes
Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

FECS Council

Prof. Manuel A.V. Ribeiro da Silva

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto
4000 Porto

History of Chemistry

Prof. Maria Alzira Almoester Ferreira
Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Working Parties

Chemical Education

Prof. Maria Elisa Maia Pestana

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Food Chemistry

Prof. José Manuel Abecassis Empis
Departamento de Engenharia Química
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

Education of Young People

Prof. Mariana Pereira

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Organometallic Chemistry

Prof. Maria Helena Garcia
Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Electrochemistry

Prof. António Fernando Silva

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto
4000 Porto

Professional Affairs

Prof. José Lopes da Silva
Centro de Química-Física Molecular
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

Analytical Chemistry

Prof. Maria Filomena Crujo Camões

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Discussion Group

Chemistry in Developing Countries

Prof. Abílio Marques da Silva
Universidade do Algarve
Unidade de Ciências Exactas e Humanas
Campus de Gambelas
8000 Faro

Computational Chemistry

Prof. Fernando M.S.S. Fernandes



Novos Pólos da SPQ

Foram criados dois novos pólos da SPQ: um no Departamento de Ciências Agrárias da Universidade dos Açores, em Angra do Heroísmo (responsável: Doutor Paulo Fialho) e outro no Departamento de Química da Universidade da Madeira, no Funchal (responsável: Doutora

Paula Castilho). Estão em curso diligências para a criação de um outro pólo, no Departamento de Ciências Tecnológicas e Desenvolvimento da Universidade dos Açores.

A Doutora Paula Robalo é a nova responsável pelo Pólo da SPQ da Universidade de Évora.

Novo Sócio Colectivo

A firma Magnetron - Comércio e Indústria de Aparelhagem Eléctrica, SA, que se dedica à importação e comerciali-

zação de aparelhagem para investigação e laboratório, é, desde Janeiro de 1994, sócio colectivo da SPQ.

7.º Encontro Galego-Português de Química

O 7.º Encontro Galego-Português de Química, realizou-se de 25 a 27 de Novembro de 1993, nas Instalações do Centro Cultural Caixavigo, na cidade de Vigo, sobre o tema geral «Química e Tecnologia da Água», tendo sido organizado conjuntamente pelo Colégio Oficial de Químicos da Galiza, Delegação de Galiza da Associação Nacional de Químicos de Espanha e Delegação do Porto da SPQ, dando continuidade ao programa de cooperação acordado entre estas instituições e abordando aspectos de Tratamento e Reutilização, Gestão, Análise e Controlo e Legislação. O programa do Encontro incluiu ainda 4 Conferências Plenárias, 6 Conferências Convidadas e uma Mesa Redonda subordinada ao tema «A água: o seu melhor destino». A lista de conferências foi a seguinte:

- Biofilmes em circuitos de arrefecimento de água: Formação e eliminação (Luís Melo, Univ. Minho);
- As competências e os sistemas de água na Galiza (Emílio García, Junta de Galiza);- Novas tecnologias em biosensores electroquímicos (Ana Maria Brett, Univ. Coimbra);

- A protecção penal do domínio público hidráulico (José Gregório, Tribunal de Justiça de Catalunha);

- Reutilização de águas de uma refinaria (Carlos Garcia, Repsol Petróleo);

- Adsorção de fenóis em resina macroreticular (Elisa Ramalho, ISEP);

- A contaminação hídrica no fabrico de papel (Juan Revenga, Univ. Complutense de Madrid);

- A gestão e financiamento das infraestruturas de água por empresas privadas (Angel Arias, Fomento de Construcciones y Contratas);

- A água e alguns mecanismos precursores de carcinogénese e mutagénese (Julio Casado, Univ. Salamanca);

- Especificação de cobre (II) em águas (Maria Teresa Vasconcelos, Univ. Porto).

O 8.º Encontro Luso-Galego de Química decorrerá de 24 a 26 de Novembro de 1994, sobre o tema «Química e Ambiente», e será organizado pela Delegação do Porto da SPQ.

J.L. Figueiredo

Banco de Dados Bibliográficos

A Sociedade Portuguesa de Química está a recolher informação sobre publicações não-periódicas de Química (incluindo Bioquímica) editadas em Portugal. O objectivo é completar, da forma mais exaustiva possível, um banco de dados que já existe na sede da SPQ. Este banco de dados bibliográficos engloba as seguintes obras: livros (incluindo traduções e

textos para o ensino secundário), sebentas, teses de doutoramento e teses de mestrado. Solicita-se a colaboração de todos os sócios da Sociedade nesta iniciativa, através do preenchimento das fichas que se encontram no fim da revista (que poderão ser fotocopiadas) com informação sobre as obras (antigas e modernas) de que tiverem conhecimento.

1.º Encontro da Divisão de Catálise da SPQ

O 1.º Encontro da Divisão de Catálise da SPQ realizou-se no dia 17 de Dezembro de 1993, nas instalações do Departamento de Química da Universidade de Aveiro, e contou com a presença de 50 participantes. A sessão de abertura foi presidida pelo Prof. Júlio Pedrosa de Jesus, que saudou os presentes em nome da Universidade de Aveiro. Durante a manhã, fez-se a apresentação dos Grupos de Investigação em Catálise, nomeadamente da Universidade de Évora, Universidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Instituto Superior Técnico, INETI, Universidade de Aveiro, Faculdades de Ciências e de Engenharia da Universidade do Porto, num total de 15 grupos. Durante a tarde foram apresentados e discutidos os 23 trabalhos científicos, sendo 14 sob a forma de poster e 9 apresentações orais. A sessão de apresentações orais foi presidida pelo Prof. Luís Sousa Lobo (UNL), sendo de realçar o excelente nível das apresentações (a cargo de doutorandos), bem como a participação activa da assistência. Realizou-se ainda a Assembleia Geral da Divisão de Catálise da SPQ, presidida por J. L. Figueiredo (FEUP), tendo sido prestadas informações sobre actividades da Divisão, Congressos Internacionais e Organismos Internacionais de Catálise. Seguidamente procedeu-se à eleição dos Órgãos Directivos para o próximo biénio,

tendo sido submetida a escrutínio secreto a seguinte proposta (nas votações participaram apenas os sócios da SPQ):

- Para Presidente da Divisão de Catálise: Prof. Francisco Lemos (IST) - Aprovada com 27 votos a favor, 3 contra e 1 abstenção.

- Para representação no Conselho do Congresso Internacional de Catálise: Prof. Luís Sousa Lobo (UNL) e Prof. J. L. Figueiredo (FEUP) - Aprovada com 29 votos a favor, 1 contra e 1 abstenção.

- Para representação na EFCATS: Prof. F. Ramôa Ribeiro (IST) e Prof. J. L. Figueiredo (FEUP) como membros efectivos, Prof. L. S. Lobo (UNL) como suplente - Aprovada com 30 votos a favor e 1 abstenção.

O Presidente eleito iniciará as suas funções após o próximo Encontro Nacional da SPQ, e tomará a seu cargo a organização do 2.º Encontro da Divisão de Catálise, durante o ano de 1995. No final do Encontro, os participantes tiveram ainda oportunidade de visitar o Departamento de Química da Universidade de Aveiro, tendo suscitado particular interesse o novo e sofisticado espectrómetro de RMN para sólidos. A organização local do Encontro esteve a cargo do Doutor João Rocha e da equipa do Departamento de Química, a quem fica a dever-se o sucesso desta iniciativa.

J.L. Figueiredo



Grupo de Química Alimentar 1.º Encontro de Química de Alimentos

Decorreu no passado mês de Dezembro (19 a 22/12), na Escola Superior Agrária de Santarém o 1.º Encontro de Química de Alimentos, uma iniciativa do grupo de Química Alimentar da Sociedade Portuguesa de Química.

O Encontro constituiu um sucesso, quer pela afluência de mais de 300 inscrições e intenções de inscrição que não foi possível atender, quer pela qualidade e quantidade de resultados apresentados, quer ainda pelo bom ambiente de convivência e colaboração que proporcionou.

A participação de oradores estrangeiros, proferindo comunicações plenárias, graças ao apoio do programa comunitário FLAIR e

também ao patrocínio da FLAD, conferiu interesse inegável a este Encontro, não só pela contribuição das comunicações apresentadas por estes oradores para o elevado nível científico observado, como também pela diversidade dos temas abordados. Para o valor científico do Encontro contribuiu também um número elevado de trabalhos realizados em colaboração com parceiros não nacionais, alguns dos quais ao abrigo de programas comunitários, e a apresentação de comunicações de autores estrangeiros que utilizaram este Encontro como via de divulgação de resultados científicos originais, conferindo-lhe características internacionais, espelho da União Europeia que integramos.

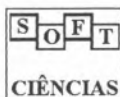
O nível da qualidade e proficiência demonstrados, e o interesse pela Química de Alimentos em Portugal, manifesto neste Encontro, permitem augurar uma possível recuperação de atrasos que até agora este sector tem manifestado relativamente a quanto sucede noutros países, havendo uma clara e manifesta necessidade de intensificar as actividades de formação.

A evolução da indústria alimentar portuguesa no quadro da União Europeia foi objecto de uma mesa redonda, tendo-se concluído acerca da urgência e desejável identificação e promoção de produtos regionais com denominação de origem referida e caracterizada, para o que será necessário desenvolver o correspondente trabalho,

por forma a permitir a sua identificação de modo expedito e eficaz.

Em reunião informal dos sócios da SPQ presentes, foi decidido dar início às actividades regulares do Grupo de Química de Alimentos. Com este objectivo foi criada uma Comissão de Química de Alimentos da SPQ, encarregada de coordenar as diversas actividades associativas bem como dinamizar iniciativas futuras. Foi ainda decidido promover a realização do 2.º Encontro de Química de Alimentos, em Aveiro, na Primavera de 1995, correspondendo deste modo a uma proposta da respectiva Universidade, tendo sido também constituída a Comissão Organizadora desse Encontro.

H.D.



Ação Comum das:

- Sociedade Portuguesa de Física
- Sociedade Portuguesa de Química
- Sociedade Portuguesa de Matemática

Para a produção de software educativo

Lançamento de mais sete programas de computador com especial interesse para os ensinos básico e secundário:



4. LECHAT
5. ÓPTICA
6. FQ-FOLHA DE CÁLCULO
7. ENERGIA
8. FRACTAIS
9. MILLIKAN
10. MOVIMENTO RELATIVO

Simulações em equilíbrio químico
Banco de óptica no computador
Programas para "Excel"
Gestão da energia na Terra
Um mundo de imagens matemáticas
Meça a carga do electrão
Relatividade para todos

Solicite os seus programas para:

Softciências
SPF - Departamento de Física
Universidade de Coimbra
3000 COIMBRA



Envie cheque no valor de 2500\$00 por cada programa com o respectivo manual (2000\$00 para sócios da SPF, SPQ ou SPM). O preço inclui os portes de correio.

Podem ainda ser adquiridos os três primeiros programas:

1. Galileo
2. Jogos Químicos
3. Kepler

Está disponível um vídeo (VHS, 15 min) sobre os programas Galileo/Kepler (2000\$00; 1500\$00 para sócios SPF; SPM; SPQ)

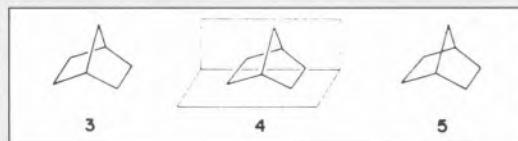
ERRATA

M.N. Berberan e Santos, *Química* 50 (1993) 34.

Na pág. 38, 3.ª coluna, faltou a última linha: "ponsável pelo tom róseo) e azul eram"

R. Hoffman, *Química* 50 (1993) 44.

Foi notado pelo autor que as figuras 3, 4 e 5 da tradução do seu artigo não estão de acordo com as originais, pelo que se faz aqui a rectificação.



L.P.N. Rebelo, A.V. Hook, Y.J.Ye, *Química* 51 (1993) 33.

Por lapso dos autores não foi referida na secção "Agradecimentos" a contribuição financeira da JNICT/FEDER (STRDA/C/CTM/626/92).

História e Desenvolvimento da Ciência em Portugal no séc. XX, crítica por J.M.G. Martinho, *Química* 51 (1993) 67. Saiu desfigurada a primeira frase da 4.ª coluna, que aqui se corrige: "Frausto da Silva faz uma descrição pormenorizada da evolução da Química Hidrológica Portuguesa, cujo início remonta a 1778, ano em que..."



Variedades

Sociedades químicas. — No relatório apresentado á *Associação internacional das sociedades químicas*, reunida em Berlim no mez de abril ultimo, o professor OSTWALD apresentou a seguinte estatística dos socios das diversas sociedades químicas que fazem parte da associação :

American Chemical Society	5:603
Deutsche Chemische Gesellschaft	3:352
Chemical Society London	3:132
Société Chimique de France	1:024
Verein Oesterreichischer Chemiker	972
Bunsen Gesellschaft	719
Società Chimica Italiana	648
Tokio Chemical Society	544
Nederlandsche Chemische Vereeniging	502
Société Chimique Russe	399
Société Suisse de Chimie	287
Société danoise	137
Société norvégienne	106

A Sociedade Chimica Portuguesa, a mais nova das suas congeneres, ainda não faz parte d'aquella Associação Internacional.

Noticia publicada na *Revista de Chimica Pura e Applicada* 7(1912). A *Sociedade Chimica Portuguesa* foi fundada em Dezembro de 1911. Tinha cerca de 100 sócios em 1913 (230 em 1917). Actualmente a *Sociedade Portuguesa de Química* possui 2.300 sócios. O número de sócios das Sociedades mencionadas na noticia de 1912 aumentou também bastante. Por exemplo a *Royal Society of Chemistry* (sucessora da *Chemical Society*, a mais antiga sociedade de Química, fundada em 1841) tem hoje 43.500 sócios; e a *American Chemical Society*, maior sociedade científica do mundo, possui 144.000 sócios. A *Associação Internacional das Sociedades Químicas* mencionada na noticia foi fundada em 1911, tendo-se transformado na IUPAC (*União Internacional de Química Pura e Applicada*) em 1919.



ARAS

ANÁLISE

BOD/CBO

EM
2 MINUTOS

um Sistema



DR LANGE

labNORMA

Equipamento de controlo de qualidade e investigação, lda.

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



Membros e Representantes Nacionais junto da IUPAC

Comités:

Teaching of Chemistry

Prof. Maria Elisa Maia Pestana, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Comissões:

*Physicochemical Symbols,
Terminology and Units (I.1)*

Prof. Maria Estela Vera-Cruz Jardim, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Thermodynamics (I.2)

Prof. Carlos A. Nieto de Castro, AM

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Prof. Manuel A.V. Ribeiro da Silva, AM

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto
4000 Porto

*Subcommittee on Transport
Properties*

Prof. Carlos A. Nieto de Castro

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Electrochemistry (I.3)

Prof. Inês Teodora Elias da Fonseca, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Chemical Kinetics (I.4)

Prof. José Manuel Gaspar Martinho, NR

Departamento de Engenharia Química
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

*Molecular Structure and
Spectroscopy (I.5)*

Prof. J.J.C. Teixeira Dias, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade de Coimbra
3000 Coimbra

Colloid and Surface Chemistry (I.6)

Prof. Ester F.A. Gouveia Barbosa, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

*Atomic Weights and Isotopic
Abundances (II.1)*

Prof. António Pires de Matos, NR

Departamento de Química
ICEN-INETI
Estrada Nacional
2686 Sacavém Codex

*Nomenclature of Inorganic Chemistry
(II.2)*

Prof. João de Oliveira Cabral, AM

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade do Porto
4000 Porto

*High Temperature and Solid State
Chemistry (II.3)*

Prof. Fernanda M. de Abreu da Costa, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

*Nomenclature of Organic Chemistry
(III.1)*

Prof. Bernardo J. Herold, TM

Departamento de Engenharia Química
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

Physical Organic Chemistry (III.2)

Prof. J.A. Silva Cavaleiro, NR

Departamento de Química
Universidade de Aveiro
Campus de Santiago
3800 Aveiro

Photochemistry (III.3)

Prof. S. Formosinho Sanches Simões, NR

Departamento de Química
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade de Coimbra
3000 Coimbra

*Polymer Characterization and
Properties (IV.2)*

Prof. J.J.C. Cruz Pinto, NR

Departamento de Engenharia de
Polímeros
Universidade do Minho
Largo do Paço
4719 Braga Codex

*General Aspects of Analytical
Chemistry (V.1)*

Prof. José L.F. da Costa Lima, NR

Departamento de Química-Física
Faculdade de Farmácia
Universidade do Porto
Rua Anibal Cunha, 164
4000 Porto

Electroanalytical Chemistry (V.5)

Prof. Maria Filomena Crujo Camões, AM

Departamento de Química
Faculdade de Ciências
Universidade de Lisboa
1700 Lisboa

Equilibrium Data (V.6)

Prof. Rita Delgado António, NR

Departamento de Engenharia Química
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

*Radiochemistry and Nuclear
Techniques (V.7)*

Prof. João M. Peixoto de Cabral, NR

Departamento de Química
ICEN-INETI
Estrada Nacional 10
2686 Sacavém Codex

Food Chemistry (VI.1)

Prof. M. Irene Noronha da Silveira, NR

Departamento de Bromatologia
Faculdade de Farmácia
Universidade de Coimbra
3000 Coimbra

Oils, Fats and Derivatives (VI.3)

Prof. José Manuel Abecassis Empis, NR

Departamento de Engenharia Química
Instituto Superior Técnico
Av. Rovisco Pais
1096 Lisboa Codex

Divisões:

- I. Physical Chemistry Division
- II. Inorganic Chemistry Division
- III. Organic Chemistry Division
- IV. Macromolecular Division
- V. Analytical Chemistry Division
- VI. Applied Chemistry Division
- VII. Clinical Chemistry Division

Estatuto:

- AM = Associate Member
NR = National Representative
TM = Titular Member



Equipamento de Laboratório

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

Vidros e Plásticos de Laboratório

Distribuidores NORMAX

Material Didáctico

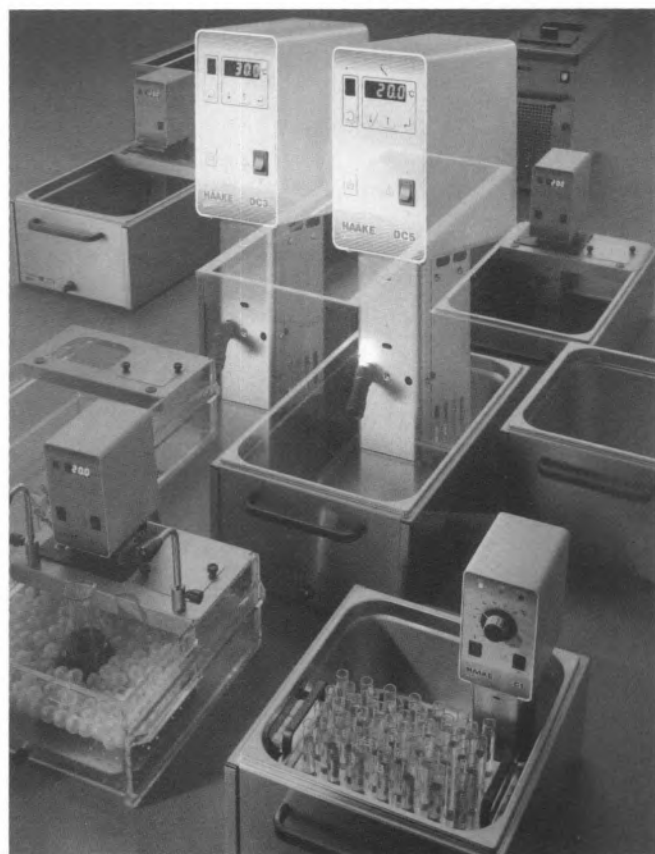
Ensino Secundário e Superior
Representantes exclusivos
SISTEDUC - Sistemas Educativos S.A.

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

HAAKE Tem a resposta para a sua aplicação específica

CIRCULADORES (-120 °C a +400 °C)

- CIRCULADORES DE IMERSÃO
- BANHOS TERMOSTATIZADOS COM E SEM REFRIGERAÇÃO
- CIRCULADORES DE ALTA TEMPERATURA
- RECIRCULADORES
- CRIÓSTATOS
- CIRCULADORES COM REFRIGERAÇÃO



VISCOSÍMETROS

- VISCOSÍMETROS DE CILINDRO COAXIAL
- VISCOSÍMETROS "CONE-PLATE"
- REÓMETROS DINÂMICOS
- VISCOSÍMETROS DE BOLA

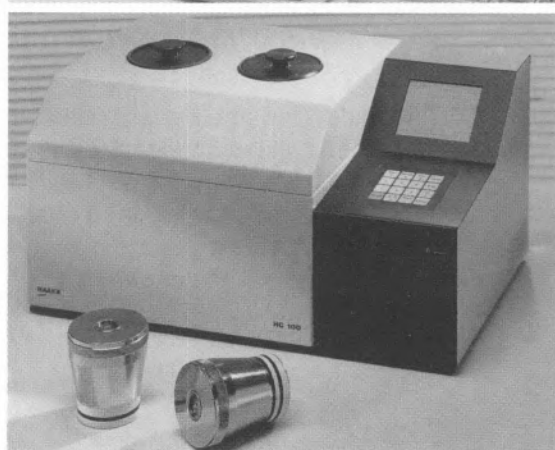
REÓMETROS

- INSTRUMENTOS DE EXTRUSÃO
- SISTEMAS PÓS-EXTRUSÃO
- MISTURADORES



INSTRUMENTAÇÃO PARA ENSAIOS DE MATERIAIS

- CALORÍMETROS
- MEDIDORES DE EVAPORAÇÃO
- INSTRUMENTOS PARA MEDIDA DA OXIDAÇÃO
- DISPOSITIVOS DE AVALIAÇÃO DA SEGURANÇA DE MATERIAIS



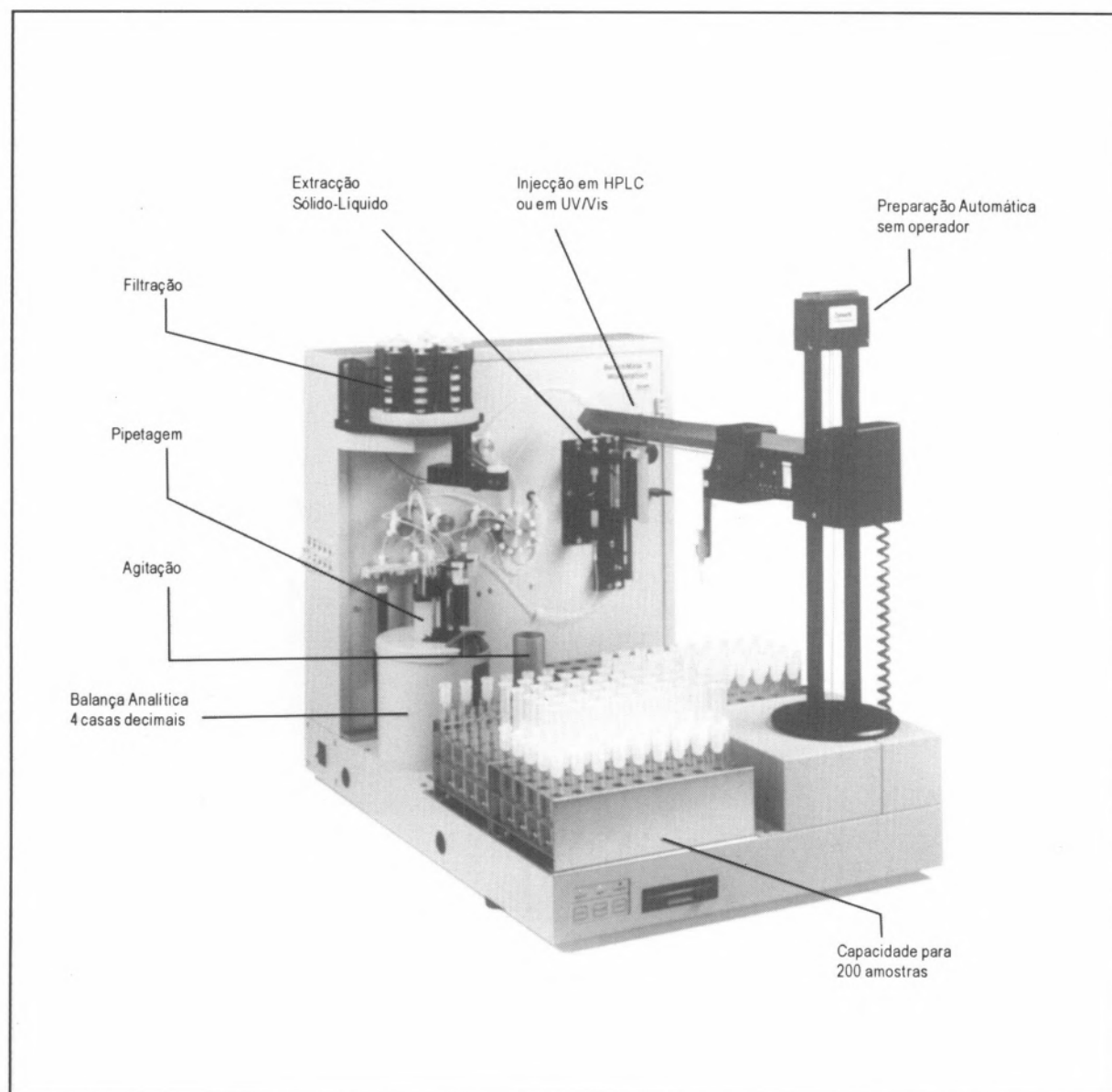
contacte

DIAS DE SOUSA LDA

INSTRUMENTAÇÃO ANALÍTICA E CIENTÍFICA

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 15, R/C - 2625 PÓVOA DE STA. IRIA - TEL. (01) 959 23 16, 959 24 09 - FAX (01) 959 08 13
RUA GONÇALO CRISTÓVÃO, 294, 7.º ET - 4000 PORTO - TEL. (02) 310839, 208 24 90 - FAX (02) 32 35 73
CANADA DOS FOLHADAIS, N.º 15 - 9700 ANGRA DO HEROÍSMO - AÇORES - TEL. (095) 3 25 12 - FAX (095) 313 38

Inovação na Preparação de Amostras



Prepara mais amostras em menos tempo - automaticamente

A Estação de Trabalho BenchMate automatiza a preparação de amostras para análises instrumentais. A BenchMate faz diluições, adiciona reagentes e padrões internos, mistura e agita soluções, calcula densidades e pesa as amostras. Técnicas manuais de limpeza

como filtração por membrana e extracção sólido-líquido são facilmente automatizadas com colunas e filtros "standard". As amostras depois de preparadas podem ser injectadas em sistemas de HPLC ou enviadas para espectrofotómetros de UV/Vis automaticamente.

Zymark®

Innovators in Laboratory Technology

Para mais informações contacte o distribuidor da Zymark em Portugal:

Dias de Sousa, Lda.
Quinta da Piedade, lote 15, r/c
2625 Póvoa de Santa Iria
Tel: 01-9592316
Fax: 01-9590813

Dias de Sousa, Lda.
Rua Gonçalo Cristovão, 294, 7º-E/T
4000 Porto
Tel: 02-310839
Fax: 02-323573

Dias de Sousa, Lda.
Canada dos Folhadais, 15
9700 Angra do Heroísmo
Tel: 095-32512
Fax: 095-31338

A visibilidade da heterodoxia científica

SEBASTIÃO J. FORMOSINHO*

O crescimento espectacular da Ciência deve muito à visão de Oldenburg ao associar as técnicas da imprensa às necessidades da comunicação científica quando organizou, em 1665, a primeira revista científica. É que as «cartas científicas» — hoje transformadas em artigos — pelo seu tamanho, esforço de preparação e rapidez de publicação, quando comparadas com o livro, constituem o meio adequado para a comunicação de uma ciência cumulativa e cooperativa. As revistas científicas constituem o arquivo público dos resultados e observações experimentais, teorias, cálculos, algoritmos, etc. aos quais todos os cientistas do futuro podem recorrer para o estímulo de novas ideias ou aplicações, ou para exercer a crítica e a refutação, tendo em vista o progresso. A comunicação científica tornou-se assim inseparável do próprio método científico, não havendo ciência sem divulgação creditada.

Um artigo científico é uma oferta de um indivíduo ou grupo de indivíduos à comunidade científica. Porém, a aceitação de uma oferta requer o reconhecimento do estatuto de doador e este reconhecimento é realizado mediante uma «avaliação por pares». Outros cientistas, escolhidos pelo Editor da revista científica, avaliam o interesse, validade e qualidade da informação contida no artigo submetido a apreciação. Estes avaliadores ou *referees* são elementos controversos no sistema de comunicação, uma vez que são também eles mesmos autores, o que origina alguns conflitos de interesse e resulta num delicado balanço no âmago da comunidade científica, sendo este o da avaliação daquilo que as próprias comunidades produzem. Mas é um sistema indispensável para creditar o material que entra no arquivo da ciência. É que os *referees* e os editores não se representam inteiramente a si mesmos, mas representam, por amostragem, o consenso científico que se estabeleceu no domínio e, por isso, têm o poder de conferir o *imprimatur* da autenticidade científica. A avaliação científica permite também uma separação dos artigos de boa e de má qualidade e uma hierarquização das revistas científicas [1, 2].

A história e a prática das ciências revelam a existência de um equilíbrio delicado entre o valor consensual da informação científica e o direito da dissidência, potencial fonte de inovação. Pode mesmo parecer surpreendente que perante o dogmatismo de uma ciência construída à volta de paradigmas, hajam emergido heterodoxias inovadoras. Verifica-se empiricamente ao longo da história que a *margem de segurança* adoptada pelas comunidades não tem sufocado em absoluto o novo. Não que a história da ciência não registe profundas controvérsias, esquecimentos injustos e até procedimentos de censura. Mas exactamente por eles terem chegado ao nosso conhecimento, patenteiam alguma tolerância para com os dissidentes e alguma *visibilidade* da heterodoxia. Claro que estando o método científico disciplinado por ortodoxias que só permitem um certo grau de dissidência, os dissidentes científicos correm o risco de perder as suas credenciais como cientistas se divergem em demasia do consenso estabelecido [3]. Por estas e outras razões, as inevitáveis controvérsias científicas e a falta de um reconhecimento julgado adequado causaram problemas psicológicos de maior ou menor gravidade em cientistas empenhados como Boltzmann, Mayer, Cantor, Semmelweis, Torricelli, ou levaram ao simples abandono da ciência como com Waterston e Grassmann [4]. Mas julgo que a respeito de tais conflitos cognitivos pouco há a fazer, a não ser a prática de métodos científicos mais conducentes à flexibilidade mental [5], e alguma aprendizagem com as lições de história das ciências que os cientistas de cada geração teimam em ignorar na sua prática corrente [2].

O que me suscita este artigo de opinião não são as dificuldades cognitivas que os cientistas revelam para assimilar conceitos novos. É a consciência de que recentemente vamos deparando com sintomas de alterações à margem de tolerância acima referida e cujas causas profundas podem matar a visibilidade das heterodoxias. Julgo mesmo que tais sistemas resultam de procedimentos

correntes que não pretendem, de forma consciente, apagar os efeitos benéficos da dissidência no âmbito das ciências. Mas é preocupante que uma censura feroz suprima qualquer publicação de dissidência, porque sem um mínimo de visibilidade não há qualquer possibilidade de debate de ideias, controvérsias científicas ou mesmo reconhecimento tardio. Aquela ciência simplesmente não existiu. E não se diga que sempre que alguém falhou uma descoberta, outrém o fará inevitavelmente mais tarde, porque a evidência empírica não confere suporte a tais asserções [6].

Mas como se alterou o equilíbrio entre a ortodoxia e a dissidência? É que a aceitação do novo não está condicionada somente por factores cognitivos. Está-o também por factores psicológicos, e pelo conjunto de *interesses* associados a um determinado campo científico e partilhados por uma dada comunidade. São interesses profissionais e de prestígio, de financiamento de investigação, intercâmbio científico, editoriais, económicos, de poder, etc. E tais interesses têm vindo a crescer perante a feroz competitividade entre cientistas, grupos de investigação, universidades e institutos de pesquisa, países, etc. Sintomas claros são o número crescente de fraudes científicas, particularmente nos domínios das Ciências da Vida e de que a revista *Nature*, entre outras tem feito eco de formas variadas [7]. O caso recente do medicamento AZT [8] para o combate à SIDA, que furando diversos dos protocolos científicos de validação, revelou-se por fim um «gigante de pés de barro». Houve mesmo um cientista, o Dr. Gordon Steward, professor jubilado da Universidade de Glasgow, que durante quatro anos viu recusado por diversas vezes a publicação de um artigo sobre a problemática colocada por este medicamento. O artigo só veio a ser publicado após ter rebentado o escândalo.

Mesmo na ausência de fraude, o conflito de interesses pode impedir muitos cientistas de acolherem heterodoxias que possam ameaçar o seu emprego, financiamento de investigação, estatuto

profissional ou prestígio. Um relato profusamente documentado por argumentos de discordância oral e escrita com colegas, *referees* e editores é o do biólogo celular H. Hilman [9]. Trata-se de um cientista britânico que travou uma dura batalha de 30 anos com editores e avaliadores para publicar as suas ideias em revistas científicas, a maioria das vezes sem qualquer êxito e que, após a aposentação, publicou esta sua saga científica.

Muitos cientistas afirmarão, e correctamente, que mais de 90% da heterodoxia científica, é lixo e, como tal, não se perde nada, antes se ganha, em não o deixar vir a lume. Contudo, esta perspectiva tem de ser contrabalançada com a das lições da história das ciências, que vêm mostrando amplamente não ser o consenso científico um sinónimo de verdade. E a ciência não se pode permitir o luxo de prescindir dos salutares efeitos do progresso daquela pequena percentagem que nalgum tempo foi heterodoxia e que, posteriormente, se veio a converter em consenso, paradigma e dogma. Mas a heterodoxia é também fonte de racionalidade ao acrescentar novas alternativas aos caminhos de ciência. Mesmo que seja um erro! Quantos erros científicos não contribuíram para a clarificação de ideias e o progresso da própria ciência. Ainda, e quicá papel mais importante, a heterodoxia científica é um travão à estruturação de «ciência viciada».

A heterodoxia científica surge quando não há acordo entre os seus autores e a comunidade científica. Este desacordo tem de ser expresso através da rejeição de artigos contendo matéria heterodoxa e submetidos a publicação em revistas científicas com avaliação. Como critério operacional, só me parece legítimo considerar um tema científico como heterodoxo após 3 (mínimo 2) rejeições consecutivas em cerca de 3 (mínimo 2) anos após a primeira submissão. Estes requisitos pretendem assegurar aos autores e à comunidade um tempo de reflexão e de reajuste de ideias, antes de submeter todo o processo a uma instância de recurso. Atendendo a naturais reajustamentos do nível dos artigos à qualidade das revistas, parece-me mais adequado que as diferentes versões dos artigos tenham sido rejeitadas sucessivamente por revistas com factores de impacto cada vez menores (mas obviamente razoáveis).

Reconhecer a heterodoxia científica não é o bastante para a publicar. Carece ainda de ser avaliada, mas por critérios distintos do procedimento corrente. Criado um pequeno corpo de editores-juizes (aos quais estaria vedado este processo de recurso), os autores da heterodoxia submeter-lhe-iam o processo de recurso com todas as versões dos artigos rejeitados e respectivos comentários dos editores e dos avaliadores. Para além deste material, apenas comprovativo do carácter heterodoxo da matéria em apreço, os autores apresentariam a nova versão do artigo que pretenderiam ver publicado, acompanhado de um resumo (não publicável), destinado a esclarecer, por forma adequada, os novos avaliadores-juizes no tocante aos quesitos da avaliação-recurso, adiante referidos. Um dos editores-juizes, actuando como presidente, enviaria a nova versão do artigo a 5 cientistas escolhidos pelo corpo de editores-juizes. Tais avaliadores-juizes devem ser cientistas com méritos já firmados e interesses diversificados, mas não devem ser especialistas na matéria em apreço, isto por dois tipos de razões. Primeiro, porque é entre os especialistas que o conflito de interesses poderá ser mais acentuado; segundo, porque os especialistas já foram consultados no processo normal de avaliação.

Cada avaliador-juiz deveria responder somente a três questões:

- i) o tema do artigo é matéria científica?
- ii) o trabalho contém erros de lógica? (em caso afirmativo indicar quais).
- iii) se as afirmações do autor se viessem a revelar correctas, este facto revestir-se-ia de [grande, médio ou pouco] interesse científico?

A heterodoxia seria julgada em termos de uma minoria qualificada que se fixaria em 1/3. Assim o corpo de editores-juizes aceitaria o artigo para publicação quando em relação às duas primeiras questões houvesse pelo menos 2 respostas favoráveis, e em relação à terceira pelo menos 2 avaliadores - juizes indicassem um interesse médio.

No pressuposto de que um procedimento deste tipo recolhe o acordo das

comunidades científicas, a publicação do artigo poderia fazer-se nalguma revista de uma sociedade científica ou em publicação criada para o efeito (por exemplo *J. Heterodox Articles in Chemistry*). O artigo deveria ser publicado com indicação de haver sido aprovado em instância do recurso, acompanhado ou não por algum comentário crítico de especialistas. Para efeitos de prioridade os autores poderiam reclamar o direito à indicação da data da primeira submissão.

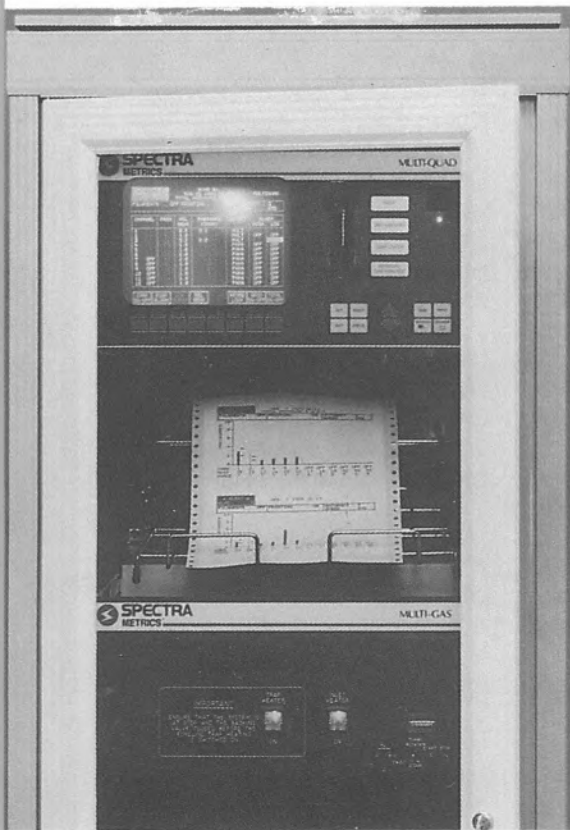
Em suma, um artigo entendido como heterodoxo poderia demorar uns 5 anos a vir a lume. É um período longo, mas permissor de longa ponderação e atractivo só para cientistas muito empenhados e convictos da certeza das duas ideias. Contudo, este procedimento seria uma válvula de escape à situação vigente, respeitaria a independência intelectual dos autores, concedendo-lhes crédito à sua capacidade científica normalmente patenteada em anteriores publicações, e poderia trazer, por um salutar efeito de retroacção, uma maior isenção e objectividade ao processo normal de avaliação.

REFERÊNCIAS

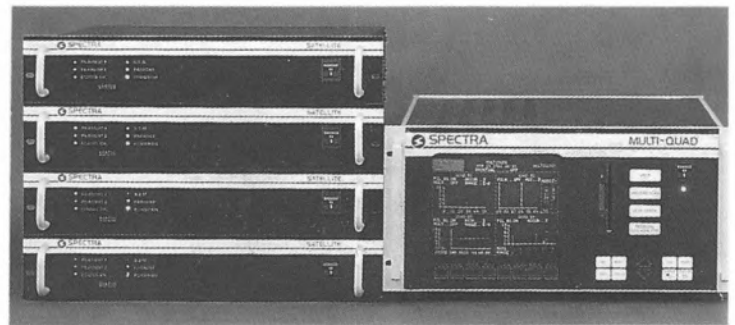
1. H.-D. Daniel, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **32** (1993) 234.
2. M.H. MacRoberts e B.R. MacRoberts, *Spec. Sci. Techn.* **3** (1980) 573.
3. M. Polanyi, *Science* **141** (1963) 1010.
4. H. Zuckerman e R.K. Merton, *Phys. Today* **25** (2) (1972) 9.
5. J.R. Platt, *Science* **146** (1964) 347.
6. M. Ruderfer, *Spec. Sci. Tech.* **3** (1980) 533.
7. E. Racker, *Nature (London)* **339** (1989) 91; outros temas similares em *ibid.* **325** (1987) 181, 207, 215; **327** (1987) 550; *Chem. Eng. News*, (1989) Jan. 23, p. 5; July 3, p. 6; May 22, p. 27.
8. H. Hillman, *The Case for New Paradigms in Cell Biology*, Edwin Millen Press, Lampeter, 1991; recensão crítica em *Chem. Britain*, June 1992, p. 513.

*Universidade de Coimbra e Universidade Católica Portuguesa

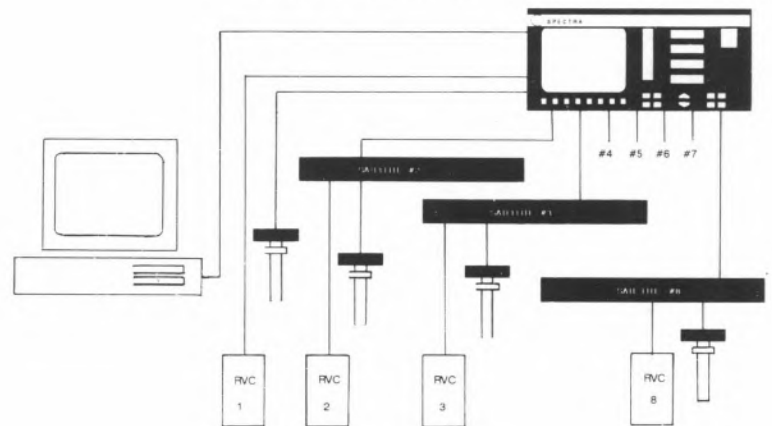
MULTI-GAS



MULTI-QUAD



THE MULTI-QUAD CONCEPT



ADSORÇÃO DESSORÇÃO

Novos DESENVOLVIMENTOS da LEDA MASS em
ESPECTROMETRIA DE MASSA

– GAS TIGHT ION SOURCE → para pressões mais elevadas
→ Detecção de ppm/ppb

- TRIPLE FILTER ANALYSER
- RGA "4 WINDOWS" Software
- Membranas para análise de gases dissolvidos em líquidos → FERMENTADORES

SUPERFÍCIES
H₂O em Aço Inox
2 – 10 ppm

A **CRIO LAB** vendeu a grande maior parte dos Espectrometros de Massa existentes em Portugal.

CRIO LAB

Praça D. Afonso V, 120
4100 PORTO (PORTUGAL)
Telef.: 351 - (0) 2 - 9964845/6
Fax: 351 - (0) 2-9964847



Da Transmutabilidade e Simplicidade da Água

A. M. AMORIM DA COSTA*

A mais prolífica invenção da química moderna, a descoberta da composição da água
F. ARAGO

1. INTRODUÇÃO

"Química Pneumática", "Química do Oxigénio", são dois epítetos usados para referenciar o sistema químico de Lavoisier. Com um e outro, pretende-se realçar a importância que a teoria sobre a composição do ar e dos gases, em geral, teve no desenvolvimento desse sistema, e também o lugar central que o mesmo reconheceu ao oxigénio na explicação de grande número dos fenómenos químicos. Todavia, com tais epítetos não se pretende necessariamente defender que a teoria sobre a composição do ar tenha sido a maior, a mais prolífica e a mais determinante contribuição da química de Lavoisier para a chamada "revolução química" ocorrida no século XVIII sobre a qual se construiu a química moderna. De facto, o contributo fulcral dessa revolução é um terreno complexo cuja análise tem suscitado o interesse de alguns estudiosos especialistas, com divergências profundas nas conclusões avançadas, como o prova a recente controvérsia Perrin - Donovan - Melhado [1-3]. Se para Perrin, o coração da Revolução Química de Lavoisier foi fun-

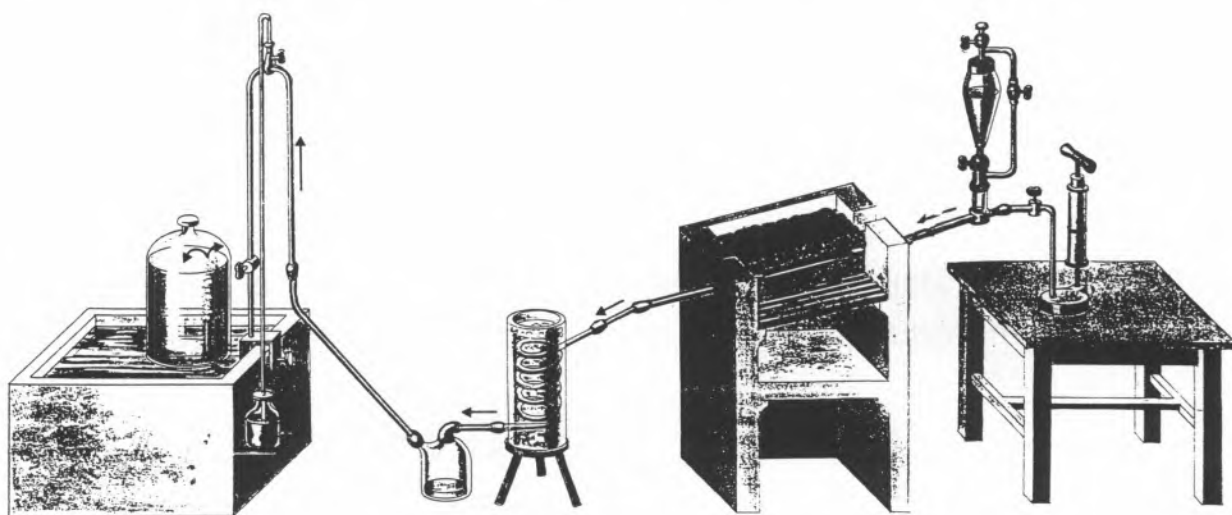
damentalmente um novo conjunto de teorias que tornou obsoletas as teorias da química flogística e se lhe substituiu por completo, sem grande ênfase para inovações de ordem metodológica [1], já para Donovan, a grande transformação da química então ocorrida dever-se-ia ao facto de a sua prática ter passado a desenvolver-se segundo os princípios metodológicos da física experimental [2], e para Melhado a grande inovação de Lavoisier teria sido o ter enquadrado os fenómenos químicos da calcinação e combustão numa teoria de agregação da matéria do domínio da Física [3]. Estes são apenas três dos muitos estudiosos especialistas que mais recentemente se têm debruçado sobre o assunto. Sem esquecer, nem minimizar o interesse da contenda, procuraremos aqui, movimentar-nos dentro dela, tomando por referência uma afirmação de Arago, no elogio histórico de James Watt que proferiu na Academia de Ciências Francesa, a 8 de Dezembro de 1834: "... sou de opinião que o nome de James Watt está ilustremente associado à maior e mais prolífica invenção da química moderna; quero dizer, a descoberta da composição da água" [4]. Sobre esta descoberta regista a história uma outra controvérsia que se centra, fundamentalmente, em torno dos nomes de James Watt, Cavendish, Lavoisier e Monge, questionando a prioridade de sua autoria [5-6]. Não preten-

demo aqui, nem retomar esta controvérsia, nem alinhar com nenhum dos grupos que militam por qualquer dos quatro nomes referidos. Queremos tão somente mostrar e pôr em relevo o lugar e a importância que a descoberta da composição da água teve no desenvolvimento dos trabalhos químicos de Lavoisier, como exemplo clássico do método científico rigorosamente quantitativo por ele usado, base das teorias que avançou [7].

2. DA TRANSMUTABILIDADE DOS PRINCÍPIOS ELEMENTARES

Na explicação do ciclo evolutivo da vida e da morte, do Uno para o Múltiplo e do Múltiplo para o Uno, Empédocles (490-430 a.C.) admitia haver algo que não perece nunca, a saber, os quatro elementos Água, Terra, Ar e Fogo, as *raízes de todas as coisas*. No decurso das diferentes combinações em que participam, estes quatro elementos caracterizar-se-iam pela sua homogeneidade e imutabilidade. Afirmando que o constitutivo último de tudo é número e triângulo, Platão associaria os quatro princípios elementares de Empédocles às duas espécies fundamentais de triângulos definidos a par-

Aparelho usado por Lavoisier para proceder à recomposição da água em Fevereiro de 1785





tir do quadrado de lados unitários e do triângulo equilátero, os triângulos cujos lados são definidos pelas relações $1, 1, \sqrt{2}$ e $2, 1, \sqrt{3}$. O único elemento formado a partir de triângulos do primeiro tipo seria a terra; por isso, ela não se transformaria nunca em nenhum dos outros três elementos, o Fogo, o Ar e a Água, elementos formados todos eles a partir de triângulos do segundo tipo e, como tais, susceptíveis de se transformarem mutuamente uns nos outros. Justificada a escolha dos quatro princípios elementares de Empédocles e Platão pelo sensualismo, Aristóteles consagrou a doutrina que sobre eles dominou a filosofia natural até Lavoisier.

Princípio elementar, a água era um elemento simples que nada podia decompor. Era, todavia, possível transformá-lo nos outros elementos simples. Em particular, era possível transformar a água em terra, já pelo processo de vegetação inerente ao crescimento das plantas, já por destilação repetida e por outras manipulações químicas. A célebre experiência de Jean Baptiste Van Helmont (1759-1644) com um pequeno rebento de salgueiro, rigorosamente pesado e apenas regado regularmente com água pura durante cinco anos, findos os quais se achou que havia aumentado 74.388,76 gramas, enquanto que a terra em que fora plantado diminuiu só de 56,7 gramas [8], dá-nos conta da crença profunda da transformação da água nos demais elementos necessários ao crescimento das plantas no processo de vegetação. Desta mesma crença sobre a transformação da água em terra no processo de vegetação, nos dão conta idênticas experiências referidas por muitos outros físicos. O próprio Lavoisier se refere a elas na sua *Primeira Memória sobre a Natureza da água*, uma espécie de introdução histórica à *Segunda Memória sobre o mesmo assunto* [9-10], onde menciona, concretamente, as experiências do mesmo gênero descritas por R. Boyle nas pp.95 e seguintes do seu *Chemista Scepticus* e na secção segunda da sua obra *De origine formarum*; e também as experiências relatadas por Trieval, Miller, Eller, Gleditsche Bonnet, Krafft, Charles Alston e Valerius. Para todos estes físicos, era ponto assente que a água se transformava verdadeiramente em terra pela operação da vegetação. E esta não seria a única possibilidade de conseguir tal transformação. Com efeito, nos seus *Fundamenta Chymiae*

Dogmaticae et Experimentalis [11], Stahl fizera notar que a água ao ser destilada repetidamente adquiria um certo carácter corrosivo; e, por sua vez, Boerhaave, Borrichius, Boyle e vários outros químicos de renome haviam deixado claro que a destilação sucessiva duma mesma água levava ao aparecimento de um resíduo terroso. Afirmando embora que pessoalmente, nunca havia procedido a mais que uma tripla destilação de uma mesma água, Boyle refere, apoiando-se na autoridade de outros químicos, que uma onça de água daria seis dracmas de terra após duzentas destilações sucessivas. Para os físicos que não acreditavam na transmutação da água em terra, quer no processo de vegetação, quer na sucessiva destilação de uma mesma porção de água, as experiências referidas não eram de todo conclusivas por não entrarem em consideração com factores os mais diversos, tais como, por exemplo, a intervenção do ar em todo o processo de vegetação, e o pó da atmosfera ou a solubilidade do vidro, no processo da destilação repetida. Não acreditando nessa mesma transmutação, Lavoisier planeou e executou uma série de experiências cujos resultados e conclusões delas extraídas constituíram o objecto do manuscrito que entregou, em primeira versão, na Academia de Ciências de Paris, em 1769, registado pelo Secretário da mesma Academia, Grandjean de Fouchy, em dez de Maio desse ano, e hoje, genericamente conhecido como *Segunda Memória sobre a Natureza da Água*, na forma como foi publicado nas Memórias da Academia Real das Ciências de Paris [10] Cuidadosamente, preparou uma amostra de água para submeter a um processo de destilação sucessiva. Nesta preparação, recorreu à água da chuva, na convicção de que a água da chuva não é senão uma água destilada pela natureza, na qual a elevação prodigiosa, comparativamente com os aparelhos de destilação usados no laboratório, a que os vapores aquosos são levados na atmosfera, parece ser meio adequado para os separar de todas as componentes salinas e terrosas que neles possam existir dissolvidos. De notar que o cuidado posto na recolha desta água da chuva se estendeu a pormenores tais como: que não fosse água da chuva caída dos telhados, nem através de qualquer vegetação, nem das primeiras precipitações, na certeza de que estas arrastam consigo numero-

sas impurezas que flutuam na atmosfera, em tempo seco, e aquelas, impurezas que revestem as superfícies minerais e vegetais, sobre que passam. Por pesagens rigorosas, até peso constante, comparou a densidade da água recolhida com a densidade de uma amostra de água natural mono-destilada, sendo a diferença de densidades constante. Submetendo a água da chuva recolhida a sucessivas destilações, verificou que após cada destilação se formava um resíduo composto de terra insípida e sal marinho, muito embora o seu peso específico se mantivesse constante. Na busca de uma explicação para esta verificação experimental, pôs-se a si próprio várias hipóteses de trabalho a que procurou, depois, dar uma resposta. Nomeadamente, admitiu que (i) a terra separada após cada destilação fosse de tal natureza que pudesse estar dissolvida na água sem aumentar o seu peso; (ii) a terra separada fosse uma terra que não existia na água antes de se proceder à destilação, formando-se durante a própria destilação como produto da operação. Na primeira hipótese, estaríamos perante uma substância imponderável, um pressuposto que se tornava cada vez mais obsoleto para os físicos da época, pouco à vontade com um flogisto sem peso, e cada vez mais convencidos de que a própria matéria do fogo aumentaria o peso dos corpos com que se combinasse, embora o não pudessem determinar experimentalmente. A segunda hipótese seria o caminho aberto à tese da transformação da água em terra por efeito da destilação, a menos que conseguisse demonstrar que, embora ocorrida durante a destilação, tal formação o não era a partir da própria água. Tentando uma resposta a tais hipóteses, Lavoisier procedeu a uma destilação sucessiva duma mesma quantidade de água em estudo, em selado pelicano de vidro, tipo do usado pelos alquimistas, durante vários meses, com início a 24 de Outubro de 1768 e termo a 1 de Fevereiro de 1769. Com uma balança de grande precisão, construída por Chemin, da Casa da Moeda, em Paris, pesou com todo o rigor, até peso constante, o pelicano e a quantidade de água a destilar, antes de iniciada a operação de "cohobação" (a designação usada para uma destilação sucessiva no tipo de destilador usado). Durante o processo, foi tentando detectar quaisquer modificações observáveis visualmente, munido de lupa apropriada.



Como ele próprio o relata, durante os primeiros vinte e cinco dias não se conseguiu aperceber de qualquer modificação apreciável. A 20 de Novembro¹, quando começava já a desesperar sobre o sucesso da experiência, observou o aparecimento de pequenos corpos flutuantes, em forma de lamela, que se moviam com grande rapidez no seio da água sob destilação. Estes pequenos corpos foram aumentado com o tempo, em número e tamanho, até princípios de Dezembro, mantendo-se, a partir de então, praticamente constantes, num aspecto e noutro. Terminada a operação, voltou a pesar com todo o rigor, até peso constante, o conjunto pelicano-água, o pelicano com o resíduo ferroso que nele se depositara durante o processo, e a própria quantidade de água que havia sido destilada. O peso do pelicano havia diminuído 0,884 gramas; porém, o peso do conjunto não se havia alterado. Daqui concluiu, imediatamente, que nem o fogo, nem qualquer outro corpo exterior ao sistema podiam ser a causa do resíduo formado. O resíduo formado deveria corresponder, no todo ou em parte, à diminuição havida no peso do pelicano, devendo-se a uma possível dissolução durante a operação, do vidro de que era feito. Pesado este resíduo, verificou Lavoisier que o seu peso era apenas de 0,260 gramas, um valor menor que a diminuição havida no peso do pelicano. Impunha-se procurar a razão e a causa da diferença. Usando um hidrómetro de precisão de volume constante, Lavoisier concluiu que o peso da água "cohobada" havia aumentado cerca de 0,780 gramas. Analisada a substância em dissolução responsável por este aumento de peso, verificou tratar-se dum resíduo em tudo igual ao que se depositara no fundo do pelicano. A quantidade de resíduo detectado era, pois, de 1,04 gramas, superando em 0,056 gramas a diminuição do peso sofrida pelo pelicano.

Lavoisier não conseguiu determinar a causa desta diferença; aventou, todavia, possíveis razões para ela, nomeadamente, a possível combinação da água com o mesmo tipo de resíduo durante a análise hidrométrica a que procedeu. Considerando que esta diferença era suficientemente pequena para pôr em causa a diminuição do peso do pelicano relativamente ao vidro depositado e em dissolução na água analisada, o carácter hipotético da explicação avançada para esta diferença, não o impediu de

concluir que a maior parte, ou mesmo, a totalidade da terra que se separa da água da chuva por destilação é devida à dissolução dos vasos em que a operação se efectua, e que "a água não muda de modo nenhum de natureza, nem adquire qualquer propriedade nova pelas destilações repetidas, a ponto de poder adquirir - como o admitira Stahl - um grau de tenuidade tal que lhe permitiria escapar através dos poros do vidro". Enfim, que a terra que Boyle, Eller e Margraff haviam retirado da água (por destilação sucessiva) mais não era que vidro separável por evaporação; de tal modo que "as experiências em que estes físicos se haviam apoiado, longe de provarem a possibilidade de mudança da água em terra, conduziram antes a pensar que ela é imutável" [12].

A referência expressa aos trabalhos de Boyle, Eller e Margraff dá redobrada força às conclusões que tira das suas experiências sobre o assunto em questão. É que Eller defendera com toda a clareza a existência de apenas dois elementos primordiais, a água e o fogo. A terra, segundo ele, resultava da transmutação da água por acção da vegetação ou por acção do fogo, no processo de destilação; e o ar resultaria da transformação da terra por acção do fogo [13].

Ao concluir pela inalterabilidade da água nas experiências relatadas por aqueles físicos, Lavoisier defendia a incomutabilidade dos elementos. Como o afirmaria uns anos mais tarde no seu trabalho *Sistema dos Elementos*: "as propriedades físicas dos elementos poderão mudar; quimicamente, permanecem, todavia, inalteráveis" [14]. Esta era a posição da química sthaliana francesa dessa altura [15].

3. DA SIMPLICIDADE DA ÁGUA

Interessado pelo estudo da natureza dos elementos e pelos processos relacionados com a sua mudança de estado, Lavoisier não acreditava, em 1769, na transmutação da água em terra. E cria, nessa mesma data, ter acabado de demonstrar com todo o rigor experimental duma determinação gravimétrica que tal não acontecia no processo de redestilações contínuas. Lavoisier continuava, todavia, a crer na simplicidade desse mesmo elemento, a água. A inalterabilidade não punha em causa a sua simplicidade. E esta sua crença haveria de perdurar ainda por vários anos. A simplicidade

dos quatro elementos primordiais, a terra, o ar, a água e o fogo, decorria com naturalidade do seu carácter elementar. Desligada da tradição aristotélica, a tradição alquimista insistiu na composição primordial da matéria, com origem no Uno, a partir de dois únicos princípios, o **enxofre** (o princípio activo) e o **mercúrio** (o princípio passivo), a que se viria juntar, mais tarde, a afirmação de um terceiro, o **sal**, causa do sabor e solubilidade dos corpos. Sem pôr de lado os quatro elementos primordiais da física de Aristóteles, no século XVI, a iatroquímica de Paracelso afirmaria que cada um desses quatro elementos era dotado dum arquê próprio, uma quinta essência da matéria, sopro divino emanado do sistema solar que vivificava os três princípios dos alquimistas. Iatroquímico de formação, Becher propôs, na sua *Physica Subterranea* [16] a redução dos princípios constitutivos da matéria a apenas dois, a **terra** e a **água**, o primeiro para tudo o que fosse seco, e o segundo para tudo o que fosse húmido. Distinguiu, todavia, três tipos diferentes de terra, a *terra vitrificável*, princípio da dureza, fixidez e infusibilidade; a *terra inflamável*, princípio da incombustibilidade; e a *terra mercurial*, princípio da volatilidade e peso. Trabalhando sobre o sistema de Becher, primeiramente em *Experimenta, Observationes, Animadversiones Chymical et Physical*, em 1697, e, depois, em 1717, em o *Tratado do Enxofre*, Stahl negaria a existência da terra mercurial, como não suficientemente demonstrada, e identificaria a terra inflamável com um princípio particular a que deu o nome de flogisto, para explicar os fenómenos da combustão, voltando à afirmação do carácter primordial do Fogo, da Terra e da Água, substituindo-se a acção do flogisto à acção do Ar. Porém, os trabalhos de Hales e Boyle demonstrando a grande influência do ar na natureza, haveriam de conceder a este, outra vez, o privilégio de elemento. Deste modo, nos finais do século XVII, a doutrina de Aristóteles sobre os quatro elementos primordiais havia readquirido o seu antigo esplendor. Mas, na evolução havida, os diferentes tipos de terra da doutrina de Becher haviam posto em causa a simplicidade desse elemento. Rouelle, cujas lições Lavoisier frequentou, nas suas considerações sobre os quatro elementos primordiais, questionou expressamente a existência de uma só terra, posto que a terra retirada de



diferentes fontes exibiam diferentes propriedades [17]. Os trabalhos de Lavoisier, a partir de 1772, sobre o fenómeno da calcinação, tendo por base uma metodologia científica de análise quantitativa em tudo idêntica à que usara nas experiências sobre a possível transformação da água em terra no processo de destilação, viriam a concluir pela não simplicidade do ar. E na sua sequência, seria posta em causa a simplicidade da água. Embora em 1777, na introdução que escreveu para o *Traité Chimique de l'Air et du Feu de Scheele*, Bergman defendesse que o Fogo era composto de "puro ar e flogisto" [18], a controvérsia sobre a verdadeira natureza de tal "elemento" continuaria por vários anos. Referenciado o Fogo, de um modo ou outro, com a luz ou o calórico, apenas a simplicidade deste elemento dos Antigos sobreviveria a Lavoisier para quem a Luz e o Calórico são as primeiras duas das cinco substâncias simples da correspondente Tabela incluída no *Traité Élémentaire de Chimie* de 1789, tidas como os elementos dos corpos, sendo o Fogo aí apresentado como um dos vários nomes do calórico [19]. A afirmação da simplicidade dos elementos primordiais sempre esteve associada com o princípio fundamental afirmado pela generalidade dos filósofos da matéria segundo o qual todos os corpos da Natureza resultariam dum certo número de corpos elementares. E de imediato, com este princípio se ligava a eterna questão filosófica da divisibilidade ou não divisibilidade da matéria até ao infinito, objecto das mais variadas considerações ao longo de todos os séculos. A simples distinção entre a divisão abstracta ou geométrica e a divisão real ou física acabaria por reduzir tal questão, em grande parte, a uma questão de palavras. Quando se considera a divisão mentalmente, nenhuma dúvida há que a matéria seja divisível ao infinito, porque por mais pequena que se imagine uma partícula de matéria, ela será sempre, e por isso mesmo, extensa, e como tal divisível em duas metades, e cada uma destas em outras, e assim por diante, até ao infinito. Porém, quanto à divisão real e efectiva, já o mesmo se não pode dizer pois que para a fazer seria mister dispor de uma eternidade de tempo e dispor, no finito, duma infinidade de partes. Quer dizer, concreta e efectivamente, a divisão tem um limite; a matéria, sob este aspecto, não pode ser dividida senão até certo ponto, para além

do qual escapa e resiste a todos os esforços que se poderiam fazer para levar mais avante a divisão; para além da qual não há na natureza agentes ou causas capazes de operar uma ulterior divisão [20]. Inegável é, porém, que o progresso da ciência dispõe, todos os dias, de novos agentes para efectivamente dividir, subdividir e voltar a dividir a matéria. Referenciar a simplicidade de um corpo à sua divisibilidade é, pois, precário; com um tal critério, o que é simples hoje poderá não ser amanhã, como expressamente o reconheceu o próprio Lavoisier [19]. Foi, todavia, este o critério que os químicos e físicos adoptaram durante muito tempo para considerarem a simplicidade ou não-simplicidade de um elemento ou de uma substância. Ao tempo de Lavoisier, e ainda por longo tempo depois dele, **corpos simples** seriam aqueles que submetidos à acção de todos os reagentes, e a todos os meios de análise conhecidos, não forneceriam mais que uma substância. Consequentemente, um corpo simples seria sempre um corpo homogéneo em todas as suas partes, formado por elementos constituintes todos eles da mesma natureza e com as mesmas propriedades. Do ponto de vista reactivo, **corpo simples** seria todo aquele que nas suas reacções com outros corpos não poderia senão aumentar de peso, e nunca diminuir, isto é, todo aquele que ao reagir com outros levaria sempre à formação de substâncias mais pesadas. Ao contrário, **corpos compostos** seriam todos aqueles que são formados por mais que um elemento diferentes, podendo, portanto, ser decompostos, pela análise, em substâncias de diferente natureza; ou ainda, todos aqueles que pela análise podem diminuir do seu peso primitivo. Assim concebida, a simplicidade de um corpo era afirmada como uma verdade transitória, dependente dos progressos da ciência. E daí, com ela ter sido relacionada, muitas vezes, a noção da divisão última da matéria, numa associação de ideias que é elemento-chave na compreensão e definição de elemento, átomo e molécula [21]. Em vez de corpos simples, Baudrimont [22] proporia a designação de elementos químicos, salientando que esta terminologia daria ideia mais clara e precisa da sua natureza, sem inculcar a sua simplicidade, servindo apenas para indicar o papel que representam na natureza, como princípios constituintes dos outros corpos.

Reportando-nos ao princípio da década de 1770, ao tempo em que Lavoisier, como referimos já, depois de se pronunciar contra a possível transmutação da água em terra, fosse no processo de vegetação, fosse sob a acção do fogo, no processo da destilação, iniciava os seus trabalhos sobre a natureza da calcinação, impõe-se afirmar que os químicos franceses aceitavam, sem quaisquer reticências, a água como elemento simples, que nenhum processo de análise conseguira, ainda, transformar em mais que uma substância, subscrivendo a afirmação bem explícita de Venel, no seu artigo da Enciclopédia defendendo que toda a água, especialmente a destilada das neves, era "simples, pura, indivisível, improduzível e incommutável" [23]. Ainda em 1778, no seu Dicionário de Química, afirmava Macquer ser a água uma substância que sempre resistira a todos os esforços feitos para a decompor. Nem sujeita ao mais intenso fogo, nem submetida à acção dos ácidos ou alcalis mais poderosos, se transformara alguma vez em qualquer substância mais simples. E até então, não havia sido possível produzi-la nunca a partir de qualquer substância anidra, restando provado que era possível retirá-la intacta das substâncias em cuja composição entrava [24]. Foi na sequência das observações feitas na já referida década de 1770, no decorrer de experiências com os diversos gases de que se verificou ser composto o ar, que pela primeira vez foi considerada a possível composição da água, levantando a questão da sua simplicidade. Terá sido provavelmente Macquer quem em 1777 primeiro notou a formação de água quando se queimava **ar inflamável** (=hidrogénio) com **ar desflogisticado** (=oxigénio), sem, todavia, tirar da observação feita quaisquer conclusões [25]. Segundo J. Priestley [26], Warltire procedia, em 1781, a experiências que lhe permitissem concluir se o calor seria ou não pesado. Nessas experiências, procedera à explosão duma mistura de **ar comum** (=ar atmosférico) com **ar inflamável** (= hidrogénio) proveniente de fontes diversas, em frasco fechado, com uma descarga eléctrica, durante a qual observara uma pequena perda de peso (que atribuiu ao calor libertado, concluindo que este tinha peso), e o humedecimento das paredes do frasco: "embora o vidro estivesse limpo e seco antes da explosão, depois desta aparecia embaciado e manchado com



uma substância fuliginosa". Nem Warltire, nem Priestley a quem ele comunicara as suas observações, associaram, nessa altura, a humidade notada a qualquer produto que pudesse ser resultado da união dos dois gases. No ano seguinte, iniciou Priestley uma série de experiências em que tentava converter a água num gás permanente [27]. Estas suas experiências foram seguidas de perto, desde o primeiro momento, por Watt e Wedgwood, a quem Priestley ia dando notícia das suas observações.

Primeiro, ao aquecer uma solução aquosa saturada de cal viva, numa retorta, feita de material calcário, Priestley observou a formação de grandes quantidades de ar; o mesmo aconteceu aquecendo, nas mesmas condições, água simples; o mesmo não acontecia, porém, se a operação fosse feita numa retorta de vidro, já que neste caso se observava apenas a formação de vapor e água. Priestley concluiu, então, que nas experiências feitas com a retorta calcária, a água se convertia em ar sob a acção da argila de que era feita a retorta². Em 1783, recorrendo a uma descarga eléctrica, Priestley fez explodir ar inflamável (=hidrogénio) com ar desflogisticado (=oxigénio) e observou que os dois gases usados desapareciam, sendo substituídos por uma quantidade de água igual ao peso deles. Posto a par destas observações, Watt comentava-as, em carta dirigida ao próprio Priestley, afirmando a composição da água, nos seguintes termos: "não nos é, portanto, lícito concluir que a água é composta de ar desflogisticado (=oxigénio) e flogisto (=hidrogénio), desprovidos do seu calor latente ou elementar?" [28]. Entretanto, também Cavendish, nesses mesmos anos de 1781 e 1782, procedia a experiências pormenorizadas sobre a combustão do ar comum e do oxigénio com o ar inflamável (=hidrogénio) obtido dos metais [29], tendo também ele observado a formação de água no processo de combustão do hidrogénio com o oxigénio, o que o levaria a concluir, ser a água composta de oxigénio e hidrogénio. Em Junho de 1783, Charles Blagden, assistente de Cavendish, numa viagem a Paris, em encontro que teve com Lavoisier e outros cientistas franceses, referiu-lhes quer as experiências, quer as teorias de Cavendish e Watt sobre a produção da água a partir daqueles gases. De imediato, Lavoisier se interessou pelo

problema e se propôs repetir as experiências que lhe eram relatadas, planeando outras de sua lavra que lhe permitissem tomar uma posição fundamentada sobre o assunto.

De todo este relato fica claro que a ideia da composição da água é de origem inglesa. Todavia, as experiências que Lavoisier delineou e de imediato realizou sobre a mesma, viriam a conferir ao problema em estudo um papel importante e decisivo na sua consolidação.

Admitindo com Cavendish e Watt que a água seria de facto composta de oxigénio e hidrogénio, Lavoisier começou por propor-se demonstrar essa composição, no seu laboratório, por recurso a rigorosa análise, já por **síntese**, já por **decomposição**. De colaboração com Laplace, Dionis du Séjour, Vandermonde, Fourcroy, Meusnier, Legendre e o próprio Blagden, começou por reproduzir em grande as experiências de Cavendish e Watt. Fiel à metodologia que sempre adoptara para os seus trabalhos, o seu objectivo era fazer melhor que os outros. As experiências que para o efeito planeou e executou são verdadeiramente espectaculares, quer pelo engenho de concepção, quer pelo rigor quantitativo de execução. Os resultados preliminares que foram apresentados e discutidos na Academia de Ciências de Paris, na reabertura das suas sessões de trabalho, pelo S. Martinho, desse mesmo ano de 1783 [30]. Os resultados e conclusões finais seriam apresentados na mesma Academia, seis meses mais tarde, na sessão de 21 de Abril de 1784 [31]. As conclusões apresentadas não deixam margens para dúvidas: "a água não é uma substância simples". Na sua preparação, nada se havia criado, nem perdido, pois a quantidade de água que se havia formado era "composta peso por peso de ar inflamável (=hidrogénio) e de ar vital (= oxigénio)" sendo "o peso da água formada igual ao dos dois ares que serviram para a sua formação". Na mesma altura, não longe de Paris, na Escola de Mézières, Monge chegava a idênticas conclusões, tudo confirmando as observações de Cavendish, Watt e Priestley, na Inglaterra. Em 1784, a composição da água era, pois, um facto estabelecido. E não restavam dúvidas quanto aos gases componentes, o hidrogénio (flogisto, ar inflamável) e o oxigénio (ar vital, ar desflogisticado). Impunha-se determinar a

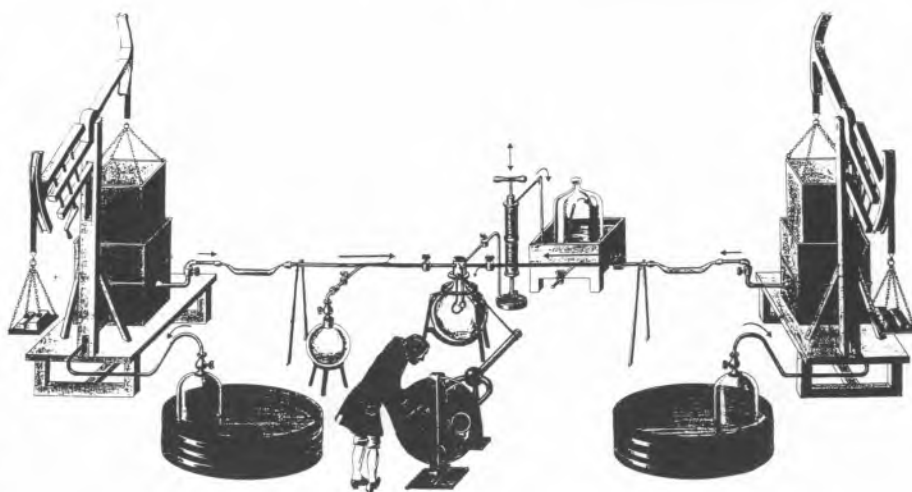
proporção relativa dos dois gases na formação do composto. Com Meusnier, Lavoisier efectua, então, no Arsenal, em Fevereiro de 1785, diante dos sócios da Academia e de elevado número de sábios estrangeiros de visita a Paris, durante três dias consecutivos, nova experiência em que decom pôs uma quantidade de água rigorosamente controlada, recolhendo os gases resultantes e usando-os de seguida, para formação de água, por síntese, tendo concluído: "a água contém por quintal quinze libras de gás hidrogénio e 85 libras de ar vital". Não era a composição rigorosa que experiências posteriores haveriam de mostrar ser a mais correcta; era, todavia, um resultado precioso e verdadeiramente extraordinário para a época e para o tipo de experiência de que decorria.

4- OS PRINCÍPIOS SIMPLICÍSSIMOS DOS VEGETAIS

Da afirmação clara da não transmutabilidade da água, e da sua composição, resultava, imediatamente, a afirmação de que "a água não é uma substância simples, nem um elemento propriamente dito", para usar expressamente as palavras do título da Memória de Lavoisier sobre o assunto. As consequências desta afirmação não se fizeram esperar no domínio dos estudos químicos. Associada com a teoria do carácter não-elementar do ar, a teoria da composição da água permitiu a Lavoisier declarar solenemente, em Junho de 1785, a morte do flogisto. Sem ignorar que a teoria do flogisto sobreviveu ainda durante muitos anos a esta declaração de Lavoisier, com adeptos de formação química a mais diversa, e com a mais variada probidade científica, já no purismo dos seus princípios, já no hibridismo de teorias conciliadoras de que é lúdima representante a teoria conciliadora de Macquer, impõe-se reconhecer que essa declaração é marco histórico de referência obrigatória na implementação do novo paradigma químico alicerçado nos trabalhos e teorias de Lavoisier. Mas, que relação imediata é possível estabelecer entre as experiências que demonstravam a natureza composta da água e o flogisto? Para a química de Lavoisier ela apresentava-se com inusitada clareza; e os químicos flogistas mais esclarecidos cedo compreenderam as dificuldades que as observações experimentais em



curso representavam para o seu sistema. Antes mesmo de Lavoisier tornar pública a sua declaração de morte ao flogisto, Richard Kirwan, autor de *Essay on Phlogiston* [32] e um dos mais acérrimos defensores da química stahliana, na Inglaterra, escrevia a Guyton de Morveau (também ele, à época, flogistista convicto, só mais tarde vindo a abandonar tal teoria, juntando-se ao grupo de trabalho de Lavoisier, tal como acontecera com Fourcroy, Chaptal e outros), afirmando expressamente: "se admitirmos a decomposição da água, teremos dificuldade em defender o flogístico". Com efeito, se ficasse demonstrado que a água e o ar eram matérias compostas e, pelo contrário, que os metais eram corpos simples (e não corpos associados ao flogisto, como decorria da interpretação das experiências de Lavoisier sobre a natureza da calcinação), o flogisto que em última análise era o princípio de explicação do modo como o fogo se podia combinar com o ar, a água e os metais, sem afectar a sua integridade, tornava-se de todo desnecessário. E novas portas se abriam na investigação da composição dos mais diversos corpos, nomeadamente no domínio do reino vegetal, chave das operações químicas que ocorrem nos organismos vivos, sabido que era ser a água o seu constituinte dominante. Como aparecia ela na sua constituição, ou como relacionar os princípios simplicísimos com a sua presença? No assim designado "ciclo flogístico" [33], o flogisto seria o elo de ligação entre os reinos animal, vegetal e mineral, constituído no princípio material comum que circularia entre eles. Todavia, só no caso das plantas, o flogisto se misturaria com a água, dado o carácter subtil da salinidade vegetal, resultado do processo de maturação em que de acordo com a própria afirmação de Stahl, ocorreria a formação dos "mais subtis e voláteis óleos". Só os vegetais seriam capazes de fabricar ácidos gordos a partir do flogisto neles acumulado, num processo de fermentação, putrefacção e combustão que envolvia a terra, o ar e o sal do meio circundante. No processo de alimentação herbívora, os ácidos gordos produzidos pelas plantas (e só por elas, pois a sua síntese artificial seria de todo impossível), incorporariam a natureza animal, verificando-se assim que todas as gorduras animais seriam, em última análise, de origem vegetal. No processo de excreção animal e no pro-



Aparelho usado por Lavoisier para proceder à decomposição da água em Fevereiro de 1785

cesso de decomposição operada pela morte dos animais e plantas, o flogisto que estivera na origem da formação dos referidos ácidos tornar-se-ia parte integrante dos metais e minerais que através do ar, da água e do sal voltaria a ser acumulado pelas plantas, assim se cumprindo o seu ciclo de circulação. Neste ciclo, os princípios simplicísimos constituintes das plantas seriam a água, o ar, o sal e o flogisto, a partir dos quais se formariam as substâncias compostas que delas era possível extrair, nomeadamente, toda a variedade de substâncias gordurosas que nelas era comum detectar. A substituição da teoria do flogisto pela teoria da oxidação, fundamentada nas teorias de Lavoisier, teve como consequência imediata o re-pensar da constituição última dos três reinos da natureza. A importância dada às operações de análise e síntese das substâncias levou Lavoisier e seus colaboradores a fixarem a sua atenção principalmente naquelas substâncias que constituíam os últimos produtos, sob o ponto de vista químico, da análise. A priori, estas substâncias seriam os blocos de construção da natureza, o mesmo é dizer, os constitutivos universais dos corpos, ou ainda, os princípios simplicísimos dos seres. O nome que lhes foi dado foi o de "elementos químicos" ou "substâncias simples". Era a nomenclatura que adoptara Guyton de Morveau na sua *Memória sobre as Denominações Químicas, a Necessidade de aperfeiçoar o sistema e as Regras para o conseguir* publicada em 1782, no *Journal de Rozier*, e que viria a ser consagrada no *Método de Nomenclatura Química* de Morveau, Bertholet, Fourcroy e Lavoisier, a Memória que Lavoisier

apresentou na sessão de 18 de Abril de 1787 da Academia Real das Ciências de Paris. Em termos de composição e nomenclatura, Guyton de Morveau, na Memória de 1782, referia quarenta e dois elementos químicos ou substâncias simples; o *Método de Nomenclatura Química* de 1787 dava conta de cinquenta e cinco; e dois anos depois, a Tabela das substâncias simples apresentada no *Traité Élémentaire de Chimie*, referia trinta e três [34]. Lançado pela química de Lavoisier como substância que não foi ainda susceptível de decomposição, o conceito de "elemento químico" ou "substância simples" teve aceitação generalizada, ainda que, em alguns casos, com alguma relutância, nos anos que se seguiram, precisando-se cada vez mais a sua natureza [21]. Paralelamente, redobrou o interesse dos químicos pelo estudo da composição dos corpos dos três reinos naturais, como chave da sua identificação, classificação e natureza. Mais do que nunca, pôs-se entre eles a questão da composição dos vegetais em termos dos seus princípios simplicísimos. Na Universidade de Coimbra, em 1799, Frei José da Cunha Rolla Pereira toma para argumento da sua Dissertação Inaugural as questões: "Quais sejam os Princípios simplicísimos dos vegetais? Será que são retirados da terra que contêm? E como contribui esta para a vegetação?" [35]. Após pormenorizadas considerações, conclui Cunha Rolla que o oxigénio, o hidrogénio e o carbono são os princípios primários e simplicísimos



dos vegetais, devendo a terra ser tida como o princípio secundário da fibra vegetal [36].

Ao concluir deste modo as suas considerações sobre os princípios simplíccimos dos vegetais, Cunha Rolla mais não fazia que repetir conclusões que haviam sido avançadas pelo próprio Lavoisier, nomeadamente nas suas *Reflexões sobre a decomposição da água pelas substâncias vegetais e animais*, Memória que apresentou na Academia das Ciências de Paris, em 1786 [37]. Como ele próprio refere neste seu trabalho, tendo repetido as principais experiências relatadas pelo Dr. Hales na sua *Estática dos Vegetais* [38], destilou, em aparelho equipado com tina pneumática para recolha dos gases libertados, diversas espécies de plantas e madeiras, tendo obtido sempre uma mistura de gás carbónico e gás inflamável (=hidrogénio), variando as quantidades relativas de um e outro de acordo com a espécie vegetal submetida a destilação, muito embora se verificasse que para um grande número de vegetais analisados a proporção de gás carbónico e gás inflamável formados fosse praticamente constante. A destilação de vegetais oleosos levava a resultados semelhantes de tal modo que as conclusões seguiam-se com naturalidade: os vegetais eram formados, em última análise, por carbono, oxigénio e hidrogénio. As matérias gordurosas, as matérias açucaradas, as matérias ácidas, as matérias licorosas e quaisquer outras existentes em muitas espécies vegetais formavam-se também a partir desses três elementos, não devendo ser consideradas, nenhuma delas, como substâncias primárias, ao contrário do que muitos pretendiam.

Com base na quantidade enorme de fluidos elásticos que se libertavam nas experiências de destilação que efectuara com vegetais, o Dr. Hales havia concluído que "o ar era o cimento dos corpos, sendo ele que ligava entre elas as moléculas dos outros elementos". Repetindo o mesmo tipo de experiências, Lavoisier concluía que o ar fixo, o ácido carbónico, nem sequer devia ser tido como parte integrante dos vegetais; a sua obtenção no processo de destilação destes, devia-se à própria destilação. Em qualquer vegetal, grande parte do hidrogénio e do oxigénio constituintes estavam unidos na proporção e nas condições que permitiam a sua existência como corpo composto, na forma de água; na destilação, esta seria neles

decomposta, com parte do oxigénio libertado a unir-se ao carbono, dado assim o determinarem as afinidades relativas de ambos, com formação de ácido carbónico [39].

Dos três princípios simplíccimos dos vegetais considerados, o carbono seria o mais abundante. Em excesso relativamente ao hidrogénio e ao oxigénio, ele seria a causa provável da acção das substâncias vegetais sobre a água. A sua reacção com o oxigénio da água levaria à formação do ácido carbónico; o hidrogénio que se libertaria nesta reacção, combinando-se com o carbono permitiria a formação das substâncias oleosas. Na base de todo o processo estaria, pois, um fenómeno de oxigenação das substâncias vegetais, o mesmo acontecendo nas substâncias animais.

5. CONCLUSÃO

Ávido duma linguagem clara, na convicção profunda de que "um dos primeiros princípios da lógica e da gramática das ciências é exprimir por uma só palavra, tanto quanto possível, o que se analisou, descreveu e definiu"[40], Lavoisier especificou no seu escrito sobre os princípios simplíccimos dos vegetais, na sua relação com a decomposição da água pelas plantas, as quatro maneiras principais de oxigenar as substâncias vegetais e animais, permitindo-lhe concluir as suas considerações sobre a decomposição da água por tais substâncias com algumas reflexões sobre a fenómeno da vegetação. No princípio dos seus trabalhos sobre a não-transmutabilidade da água, haviam estado questões levantadas pelo processo da vegetação e por observações laboratoriais em processos de destilação. Complementares, umas e outras foram para Lavoisier a base em que assentou as teorias do paradigma químico que caracteriza o seu sistema. Afirmado o conteúdo das teorias que construiu em torno da composição do ar e da água, somos assim levados à necessidade sentida por Lavoisier de reformular a própria teoria referente ao processo da vegetação. Ele próprio o declara expressamente como conclusão natural da Memória sobre a decomposição da água pelas substâncias vegetais e animais, que temos vindo a referir: "Terminarei esta Memória com algumas reflexões relativas à vegetação. Sempre que nos propomos decompor uma substância formada pela reunião de dois prin-

cípios, podemos atacar separadamente um ou outro desses princípios: é o que os antigos químicos pretendiam dizer quando afirmavam que os mixtos têm diferentes lados, diferentes *latus*, e que as combinações se formam pelos *latus* análogos. Sendo a água composta de duas substâncias, o oxigénio e o hidrogénio, é susceptível de ser decomposta por um ou por outro destes *latus*. Em todas as combustões, sejam ardentes, sejam obscuras³, é sobretudo pelo *latus* do oxigénio que se opera a decomposição; há, porém, uma operação na natureza na qual esta mesma decomposição se opera pelo *latus* oposto, ou antes, por uma dupla afinidade, é a vegetação.

"Para se fazer uma ideia do que se passa nesta grande operação que a natureza parecia ter escondida, até aqui, envolta num véu espesso, é preciso saber que não pode haver vegetação sem água e sem ácido carbónico; estas duas substâncias decompõem-se mutuamente no acto da vegetação, pelo seu *latus* análogo; o hidrogénio deixa o oxigénio para se unir ao carbono, para formar os óleos, as resinas, e para constituir o vegetal; ao mesmo tempo, o oxigénio da água e do ácido carbónico liberta-se em abundância, como o observaram Priestley, Ingenhouz e Sennebie, e combina-se com a luz para formar o gás oxigénio. "Limite-me a anunciar esta teoria, não me sentindo ainda em condições de desenvolver as provas necessárias e relativamente à qual, por outro lado, no meu entender, os resultados não são evidentes; só no próximo ano poderei repetir as primeiras experiências que fiz sobre este assunto, confrontá-las com as experiências feitas por Priestley, Ingenhouz e Sennebie, e juntar-lhe outras em que estou a pensar" [41]. Estávamos em 1786. Há mais de quinze anos que Lavoisier se confrontava com problemas postos pela natureza da água. Assentara já que se tratava de uma substância que não podia ser tratada como uma substância simples, pois se compunha de oxigénio e hidrogénio, e uma substância que se não transformava em ar, fosse no processo da vegetação, fosse no processo de destilação, por mais que fossem as vezes que sobre a mesma água se repetisse a operação. Outras questões continuavam, contudo, em aberto, estritamente relacionadas com as já resolvidas. Fiel à metodologia que sempre o guiara, Lavoisier propunha-se dar-lhe uma resposta, buscando em experiências rigorosas o fundamento das teorias.



REFERÊNCIAS

1. C. E. Perrin, *Revolution or Reform? The Chemical Revolution and XVIIIth Century Views of Scientific Change*, History of Science, **25** (1987), 395-423. *Ibidem*, *Chemistry as Peer of Physics, a response to Donovan and Melhado on Lavoisier*, Isis, **81** (1990), 259-270;
2. A. Donovan, *Lavoisier and the origins of modern chemistry*, Osiris, **4** (1988), 214-231; *Ibidem*, *Lavoisier as Chemist and Experimental Physicist; a reply to Perrin*, Isis, **81** (1990), 270-272.
3. E. M. Melhado, *Chemistry, Physics and the Chemical Revolution*, Isis, **76** (1985), 195-211; *Ibidem*, *On the Historiography of Science: a reply to Perrin*, Isis, **81** (1990), 273-276.
4. F. Arago, *Historical Éloge of James Watt*. Trad James Patrick Muirhead, Londres, 1839, pg.95.
5. S. M. Edelstein, *Priestley settles the water controversy*, Chymia, **1** (1948), 23- 137.
6. R. E. Schofield, *Still more on the Water controversy*, Chymia, **9** (1964), 71 -76.
7. J. B. Gough, *Lavoisier's Memoir on the Nature of Water and their place in the Chemical Revolution*, Ambix, **30** (1983), 89-106; A. N. Meldrum, *Lavoisier's Work on the Nature of Water and the supposed transmutation of Water into Earth (1768-1773)*, Archeion, **14** (1932), 246-247; M. Dumas, *Lavoisier's relatively unknown large-scale decomposition and synthesis of water, Feb27 and 28, 1785*, Chymia, **5** (1959), 113-129.
8. J. B. van Helmont, *Ortus Medicinæ. Id est Initia Physical Inaudita. Progressus Medicinæ novus, in morborum ultionem, ad vitam longam*, Amsterdam, Ludovicus Elzevir, 1648, 104-110.
9. A.L. Lavoisier, *Première Mémoire sur la nature de l'eau et sur les Expériences par lesquelles on a prétendu prouver la possibilité de son changement en terre*, Mém. Acad. R. Sci. (Paris), 1770, (1773), 73-82; *Oeuvres de Lavoisier* (Paris, Imprimerie Impériale, 1862), vol.2, 1-11.
10. A.L. Lavoisier, *Deuxième Mémoire sur la nature de l'eau et sur les Expériences par lesquelles on a prétendu prouver la possibilité de son changement en terre* in Mém. Acad. R. Sci. (Paris), 1770, (1773), 90-107; *Oeuvres de Lavoisier* (Paris, Imprimerie Impériale, 1862), vol.2, 11-28.
11. E. Stahl, *Fundamenta Chimiæ Dogmaticæ et Experimentalis*, Nuremberg, 1723; D. Oldroyd, *An examination of G. E. Stahl's Principles of Universal Chemistry*, Ambix, **20** (1973), 35-52.
12. A. L. Lavoisier, *Deuxième Mémoire sur la Nature de l'eau....Oeuvres*, loc. cit., pp. 25-26.
13. J. T. Eller, *Dissertation sur les éléments ou premiers principes des corps*, Mem. Acad. R. Sciences (Berlin), **2** (1746), 3-48.
14. *MSS Acad. R. Sci.* (Paris), Lavoisier, 1670, Bn. Texto completo in R. Siegfried, *Lavoisier's View of the Gaseous State and its early application to pneumatic chemistry*, Isis, **63** (1972), 59-78.
15. M. Fichman, *French Stahlism and Chemical Studies of Air*, Ambix, **18** (1971), 94-122; J. B. Gough, loc. cit., pg. 98.
16. J. J. Becher, *Physica Subterranea*, 1669 (Leipzig, Joh. Ludov. Gleditschium, 1703).
17. G. F. Rouelle, *Cours de Chimie*, Ms. 265 [307], 1762, Biblioteca de Nancy, pg. 30.
18. H. Cassebaum and Kauffman, *The analytical concept of a chemical element, the work of Bergman and Scheele* in Annals of Science, **33** (1976), 447-456.
19. A. L. Lavoisier, *Traité Élémentaire de Chimie* (Paris, 1789) in *Oeuvres de Lavoisier* (Paris, Imprimerie Impériale, 1864), Tom.I, Part. 11, pg.136-137.
20. J. A. Simões de Carvalho, *Lições de Philosophia Chimica*, (Coimbra, Imprensa da Universidade, 2.^a Ed. 1859), pp.26-27.
21. R. Hooykaas, *The concept of "element" in its historical-philosophical development*, Selected Studies in History of Science (Coimbra, Universidade, 1983), 1-8; *Ibidem*, *The concept of individual and species in chemistry*, o. cit., 145-166.
22. A. E. Baudrimont, *Introduction à l'Étude de la chimie par la Théorie atomique* (Bordeaux, 1833).
23. G. F. Venel, "Eau", *Encyclopédie*, vol. 5, Paris, 1755, 188-193.
24. P. J. Macquer, *Dictionnaire de Chymie*, 4 vols (Paris, 1778), vol.1, pg. 546.
25. *Ibidem*, pg. 583.
26. J. Priestley, *Experiments and Observations Relating to Various Branches of Natural Philosophy*, vol.I, Londres,1779; vol.II, Birmingham, 1781, Appendix, pg.395
27. H. Carrington Bolton, *Scientific Correspondence of Joseph Priestley*, New York, 1892, pg.43
28. J. P. Muirhead, *Correspondence of the Late James Watt*, Londres, 1846, pp.17; 82.
29. H. Cavendish, *Experiments on Air*, Transactions of the Royal Society, **74**, (1784), pp. 119- 153; *Ibidem*, *Alembic Club Reprint*, n.3, London, 1893.
30. A. L. Lavoisier et Meusnier, *Mémoire dans lequel on a pour objet de prouver que l'eau n'est une substance simple, un élément proprement dit, mais qu'elle est susceptible de décomposition et recomposition* in Mem. Acad. R. Sci. (Paris), 1781 (1784), 468-494; *Oeuvres de Lavoisier* (Paris, Imprimerie Impériale, 1862), vol. 2,334-359.
31. A. L. Lavoisier et Meusnier, *Mémoire où l'on prouve, par la décomposition de l'eau, que ce fluide n'est point une substance simple, et qu'il y a plusieurs moyens d'obtenir en grand l'air inflammable qui y entre comme principe constituant* in Mem. Acad. R. Sci. (Paris), 1871 (1874), 269-282; *Oeuvres de Lavoisier* (Paris, Imprimerie Impériale, 1862), vol. 2, 360-373.
32. R. Kirwan, *Essay on Phlogiston* (Londres, 1787); *Ibidem*, *Essay on Phlogiston and the Constitution of Acids* (Londres, 1789). Nota: Este Tratado foi traduzido para francês por M.^{me} Lavoisier e cada uma das suas secções foi objecto de refutação cuidadosa por Lavoisier ou por algum dos seus colaboradores.
33. M. Teich, *Circulation, Transformation, Conservation of matter and the balancing of the biological world in the XVIIIth Century*, Ambix, **29** (1982), 17-28.
34. R. Siegfried, *Lavoisier's Table of simple substances: its origin and interpretation*, Ambix, **29** (1982) 29-48; C. Perrin, *Lavoisier's Table of the Elements, a reappraisal*, Ambix, **20** (1973) 95-105; A. M. Ducan, *The function of affinity tables and Lavoisier's list of elements*, Ambix **17** (1970), 28-42; *Ibidem*, *Some theoretical aspects of XVIIIth. Century Tables of Affinity*, Annals of Science, **18** (1962), 177-194; 217-232; J.W. Llana, *A contribution of Natural History to the Chemical Revolution in France*, Ambix, **32** (1985), 71-91.
35. Josephus a Cunha Rolla Pereira, *Vegetabilium Principia Simplicissima*, (Coimbra, 1799), Ms, 1367 da Biblioteca Geral da Universidade de Coimbra, pp. 123- 140.
36. *Ibidem*, pg. 50. 37 - A. L. Lavoisier, *Réflexions sur la décomposition de l'eau par les substances végétales et animales* in Mem. Acad. R. Sci, 1786, 590-605; *Oeuvres de Lavoisier* (Paris, Imprimerie Impériale, 1862), vol. 2, 656-670 .
38. S. Hales, *Vegetable Staticks*, Londres, 1727.
39. A. L. Lavoisier, *Réflexions sur la décomposition de l'eau par les substances végétales et animales.*, *Oeuvres de Lavoisier*, loc. cit., pp.662-663.
40. *Ibidem*, pg. 669.
41. *Ibidem*, pg. 669-670.

NOTAS

¹ No texto reproduzido no vol. 2 das Oeuvres, refere-se 20 de Dezembro, o que é manifestamente um lapso, consideradas todas as referências cronológicas em causa.

² Meses mais tarde, depois de Watt lhe ter afirmado a sua teoria sobre a composição da água, Priestley poria totalmente de parte esta sua hipótese da possível conversão da água em ar sob a acção da argila, explicando os resultados observados com base na porosidade da retorta feita de argila que permitiria a entrada de ar e saída de água, como pormenorizadamente o explicaria no trabalho que sobre o assunto viria a apresentar na Royal Society, nesse mesmo ano (cf. J. Priestley, *Experiments Relating to Phlogiston and the seeming conversion of Water into Air in Trans. Roy. Society*, vol.73, 1783, pp. 398 ss). E penitenciava-se junto de Watt, por ter avançado com aquela primeira explicação, nos seguintes termos: "este aparelho (a retorta de argila que usara) quase arruinava por completo a tua maravilhosa hipótese, e quase inutilizou o meu trabalho de interpretação e escrita de algumas semanas" (Cf. J. P. Muirhead, *Correspondence of the Late James Watt*, loc.cit. pg.26).

³ Parágrafos antes, na Memória que estamos a citar, Lavoisier definira estes dois tipos de combustão: a combustão pelo ar, acompanhada de brilho e luz - a combustão ardente; e a combustão por acção da água e dos ácidos, sem qualquer manifestação luminosa - a combustão obscura.

*Dept. de Química, Universidade
3000 Coimbra, Portugal



A Comunicação Científica entre João Jacinto de Magalhães e Antoine-Laurent Lavoisier

ISABEL MARIA MALAQUIAS*

Nesta comunicação pretendemos apresentar alguns testemunhos da interação científica entre João Jacinto de Magalhães e Antoine-Laurent Lavoisier, numa época particularmente rica do desenvolvimento da nova química (1772-1777). A reflexão incide sobre a temática da água e os esforços desenvolvidos para a obtenção de águas minerais artificiais e dessalinização da água, utilizáveis em viagens marítimas longas, assunto de interesse científico comum.

A comemoração do bicentenário da morte de Antoine-Laurent Lavoisier (1743-1794) suscitou-nos a reflexão presente no sentido de o homenagearmos e de desvendarmos também o seu relacionamento com o físico e instrumentalista português João Jacinto de Magalhães (1722-1790).

A física experimental teve, durante o século XVIII, um grande desenvolvimento e o próprio Lavoisier considerava-se mais um «physicien» que propriamente um «chimiste». Deve-se a ele, por exemplo, a proposta de criação de uma classe de «physique expérimentale» na Académie Royale des Sciences de Paris[1].

João Jacinto de Magalhães revelou uma actividade variada, tendo-se debruçado sobre temas de física, de química, de astronomia, sobre instrumentos e assumido um papel de relevo na comunicação científica da época. Fixou a sua residência em Londres, em fins de 1763, por esta ser a cidade europeia onde encontrou maior correspondência com os seus interesses de instrumentalista, depois de uma curta estada em Paris, onde integrou, apadrinhado pelo Dr. Ribeiro Sanches, um círculo amplo de homens de ciência e prestígio político social [2, 3, 4a].

Lavoisier entrou, em 1754, para o Collège des Quatres Nations (ou Mazarin), tendo, em 1761, abandonado os estudos que o levariam a um bacharelato em Artes, para transitar para o de Leis, na perspectiva de seguir os passos

paternos. Licenciou-se em 1764, embora o seu interesse pela ciência fosse manifesto desde há algum tempo, pois prosseguia a sua formação neste campo, paralelamente. Estudou astronomia com La Caille (1713-1761) e realizou «promenades philosophiques» com o botânico Jussieu, embora esta não fosse uma área para que mostrasse particular vocação. Com La Caille adquiriu inclinação para o quantitativo, bem como interesse nos fenómenos meteorológicos e nas observações barométricas (hipsometria).

O geólogo Jean-Étienne Guettard, amigo da família, influenciou Lavoisier a estudar química, pois reconhecendo-lhe aptidões naturais para a ciência, tê-lo-á aconselhado a frequentar o curso de química de Rouelle, pois considerava que um mineralogista devia possuir bons conhecimentos de química para melhor identificar e classificar as rochas e minerais. Assim, durante os anos de 1762-63, Lavoisier dedicou-se à Química, enquanto acompanhava Guettard na elaboração de um atlas geológico e mineralógico de França — este era um projecto antigo de Guettard (1746), para o qual teve apoio oficial somente a partir de 1766. Este projecto cartográfico continuou até 1770, altura em que «completaram e publicaram dezasseis quadrângulos regionais»[1] com simbologia adequada para as diferentes formações rochosas e espécies minerais.

Nas várias saídas que fez com Guettard, Lavoisier recolheu amostras de águas minerais para análise, pois pretendia saber qual o grau de potabilidade das mesmas, ao mesmo tempo que se interrogava sobre as mudanças que teriam ocorrido na Terra e alterado a sua superfície. Isto conduzi-lo-ia a uma teoria da formação das rochas, com base nas de Guettard, Rouelle e Buffon, em que admitiu pela primeira vez, que poderia ter havido uma «sucessão de épocas marcadas por um avanço e retrocesso cíclicos do mar»[1], que justificariam a existência, numa região de «terra nova», e camadas litorais (de seixos), formadas em alturas diferentes.

A investigação química mais antiga de Lavoisier remonta ao Outono de 1764. Dizia respeito à constituição do «gypsum», isto é, do gesso. Pretendia Lavoisier que «fosse o primeiro artigo de uma série dedicada à análise mineral das substâncias». Este inventário sistemático era para ser efectuado, não pelo método de J. H. Pott — que expunha os minerais à acção do fogo — mas por reacções em solução, por «via húmida». «Procurei copiar a natureza», escreveu Lavoisier. «A água, este solvente quase universal... é o agente principal que ela emprega; e também aquele que adoptei no meu trabalho»[1].

A comunicação dos resultados foi feita na Académie des Sciences a 25 de Fevereiro de 1765, tendo sido impressa três anos depois. Nesta altura, Lavoisier aspirava a ser seu membro, o que veio a acontecer apenas em 1768; contudo, os seus apoiantes incluíram o seu nome na lista de candidatos em 1766, após este ter concorrido ao prémio da Académie para o melhor método de iluminação das ruas de Paris. A intenção era que fosse admitido como «adjoint chimiste», pois vagara este lugar.

Lavoisier continuou os seus trabalhos analíticos que o conduziram, em 1768, a um artigo extenso sobre as suas amostras de água, em que usava como instrumento de precisão o hidrómetro. Este artigo foi também lido na Académie e, pouco depois, foi eleito membro (18 de Maio de 1768) juntamente com Antoine Gabriel Jars (1732-1769). Este, que era engenheiro de minas, foi designado «adjoint chimiste» e Lavoisier «adjoint chimiste surnuméraire».

Na análise das águas minerais, Lavoisier propunha um método diferente do usado habitualmente. Neste fazia-se a evaporação à secura da água e determinava-se, qualitativa e quantitativamente, qual o sal dominante numa dada amostra. No novo método, determinava «a concentração do sal característico, fazendo medidas da gravidade específica da amostra de água com o seu hidrómetro»[1].



Algumas águas minerais eram usadas em medicina, pois verificara-se que, em alguns casos, facilitavam o processo digestivo, e em outros, aliviavam os padecimentos causados por cálculos biliares e renais.

Assim, desde os finais do século XVII, fizeram-se análises destas águas, e, por se acreditar que era possível reproduzi-las pela adição de determinados sais, na devida proporção, houve quem as tentasse produzir artificialmente. Verificou-se também que algumas possuíam uma quantidade de gás elevada, que parecia diferente do «ar comum» — o chamado «espírito mineral». Por volta de 1750, o químico francês Venel identificava a existência de uma grande quantidade de gás nas águas de Spa, que não distinguiu do «ar comum» [5]. O reconhecimento de que este gás era dióxido de carbono, isto é, o «ar fixo» foi feito por Joseph Black, em 1754.

A identificação da composição do «ar comum» foi um assunto que preocupou grandemente os experimentalistas da segunda metade do século XVIII. Esta questão teve relação também com a produção de águas minerais artificiais.

Por volta de 1770, Priestley começou a interessar-se pela produção de águas gasificadas para o que, em 1772, possuía já um método aceitável — num vaso com cal deixava ácido sulfúrico e transferia, por meio de um tubo abdutor, o gás libertado para um outro que se encontrava invertido e cheio de água, sobre uma tina [6].

A referência mais antiga ao relacionamento de Priestley com J. J. de Magalhães data de Março de 1771, altura em que este foi convidado de Priestley para assistir às experiências que iria efectuar numa sessão da Royal Society, em Londres [7a].

Magalhães divulgou o método de Priestley por vários amigos e correspondentes no «continente», a pedido do primeiro, pois mantinha já uma correspondência vasta na época.

Magalhães deverá ter tido conhecimento de Lavoisier, através dos amigos que tinha na Académie des Sciences. Nos primeiros tempos da sua expatriação, J. J. de Magalhães permaneceu por largos períodos em Paris, onde se dedicou a estudos de astronomia com Delisle e Messier, como parece saber-se a partir de uma carta de 1759 [8]. La Caille era então um astrónomo de renome, em particular pela sua tentativa de medição do

arco de meridiano, no Cabo da Boa Esperança, em 1750. É natural que, por volta de 1762-63, Magalhães tivesse tido quaisquer referências relativas ao jovem promissor que era Lavoisier, que fora aluno do mesmo. Mas destes anos, da saída de Portugal até à sua fixação em Inglaterra, sabe-se muito pouco.

De todo o modo, Magalhães surge, em 1769, ligado a Trudaine de Montigny [9], intendente geral de finanças em França. Este contacto foi feito através de Louis-Henri Duchesne (1724-1793), que era secretário do jovem Montigny. Para além dos interesses relacionados com os cargos que ocupava, que o obrigavam a conhecer os avanços tecnológicos existentes em outros países, nomeadamente em Inglaterra, Montigny tinha uma inclinação especial para a química, que considerava de grande utilidade pública. As notícias de que Magalhães enviava de Londres eram particularmente importantes, pois foi por seu intermédio, e também por cartas enviadas inicialmente ao químico Macquer [10], que as experiências da química pneumática inglesas foram divulgadas em França e influíram no surgimento da «revolução química» [7b]. O cargo ocupado por Trudaine de Montigny permitia usufruir do privilégio de franquia, pelo que Magalhães usava o seu endereço para lhe enviar encomendas de instrumentos, livros, etc., bem como para outros amigos, como Ribeiro Sanches, Messier, Bochart de Saron, Lavoisier.

Em 1771, Magalhães foi eleito membro correspondente da Académie Royale des Sciences, tendo contado com o apoio de Trudaine, conforme se depreende do que escrevia a Duchesne, a 23.4.1771 [11a]:

«Les idées que vous me donnez par Raport à L'Acad. Roy.», marquent bien La bonté de votre Coeur pour moi, & caractérisent très notam. La sincereté de l'amitié dont vous m'honorez. Il y a quelque tems, que je m'aperçus de pouvoir reussir, peut être, dans cette atteinte, ayant egard aux diferens amis, qui semblent être portés à ma faveur dans L'Academie. Même quelques uns me l'avoient fait entendre: mais ayant fait la reflexion, que celà m'apporteroit un degré de consideration, & d'honneur tout Sec, qui pour un Philosophe dans ma situation, & de ma façon de penser, me seroit plus à charge, & non pas d'aucune façon avantageux, Je n'ai jamais eu la moindre envie de l'entreprendre. Pour le

present, L'affaire a une apparence tout à fait differente, par Les esperances, que Vous me marquez dans Votre Lettre: & outre celà, c'est assez que M. Trudaine l'approuve, pour que je prend? courage & me jete entierem. entre Les dispositions & avis d'un tel ami comme vous. Ainsi vous pouvez compter, que Je ne manquerai d'baucher une petite Memoire, sur un objet, qui me semble interess. dans La mecanique, & que Je tacherai de vous envoyer au plutót: en vous priant d'en corriger La Language, avec quelque ami intime sur lequel vous pouvez compter.»

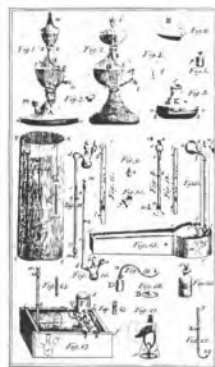
A intenção era Magalhães ficar correspondente de M. Coumière [11b], amigo de Duchesne, o que não veio a acontecer, por um pequeno precalço, ficando como interlocutor Bory, que conhecera quando ainda era cônego regente em Coimbra.

As primeiras referências que Lavoisier terá tido de Magalhães parecem corresponder ao conhecimento de cartas deste, que foram lidas na Académie Royale des Sciences, na presença do primeiro. Guerlac [7c] informa-nos que, quando o químico Macquer leu a carta sobre as observações feitas por Priestley, relacionadas com a purificação do ar viciado, pela presença de plantas, e também sobre as propriedades curativas do «ar fixo», no tratamento de certo tipo de cancro, na sessão de 1 de Abril de 1772, Lavoisier estava presente.

As relações de Lavoisier com Magalhães foram amistosas, tanto quanto é visível pelas cartas enviadas por este último a Lavoisier e à sua «Epoque philosophique» e mesmo pela afirmação de Grimaux [12b]: *«un de ses amis que habitait Londres, Magalhaens ou Magellan».*

Magalhães enviou a Lavoisier memórias científicas recentes, surgidas em Londres, em que se incluíam as últimas experiências de Priestley, bem como instrumentos para o seu laboratório no Arsenal.

A 5 de Julho de 1772 [13a], Magalhães escreveu a «um dos seus amigos de Paris» (provavelmente Bory), comunicando o método de Priestley de preparar águas minerais artificiais por meio do «ar fixo», que seria útil na prevenção do escorbuto nas grandes viagens por mar. Mencionava, ainda, todas as descobertas feitas até então sobre este assunto, pelo Dr. Macbride, pelo Dr. Brownring e por Priestley, referindo



DESCRIPTION OF A GLASS-APPARATUS FOR MEASURING THE BEST MINERAL WATERS OF PYRMONT, SPA, SELTZER, SEYDITZ, & LA-CLAPELLE, AND WITH THE DESTRUCTION OF TWO NEW EUDIOMETERS. OR INSTRUMENTS for determining the Wholeness of RHEINISH AIR, And the Method of using their INSTRUMENTS, IN A LETTER TO YOU By J. H. de MAGELIEN, F.R.S. THE THIRD EDITION, Enriched, Corrected, and Enlarged by the AUTHOR, with an Explanation of the Structure of Mr. J. LAVOISIER'S, &c. &c. with a NEW EUDIOMETER. LONDON: PRINTED FOR THE AUTHOR, MDCCLXXII.

Figura 1

que o método deste último tivera a aprovação do «Collège des Medecins de Londres», pelo que o Almirantado consentira em verificar o mesmo numa viagem aos mares austrais.

Dois dias depois [13b], Magalhães escrevia a Trudaine de Montigny, enviando-lhe também o método de Priestley:

«Le papier ci-joint renferme La methode pour faire des eaux acidules & calybées, que j'ai abregé en françois & generalisée à la portée de tout le monde, d'après celle du D.^r Priestley, dont je eus l'honneur de vous envoyer des copies imprimées par la poste derniere. Je pense avoir detaillée assez nettement ma particuliere methode, un peu diferente de celle de l'Inventeur, pour ne pas avoir besoin d'aucune planche pour que tout le monde La comprendre.

Si vous pensez si avantageusement de cette converse, comme plusieurs le pensent icy [& je suis du nombre aussi] Je souhaiterois qu'on La fisse imprimer tout de suite chez vous, car ce ne fera pas audelà d'une feuille d'impression, & qu'on la repandit gratis par toute La france, pour que tous soient à meme de s'en utiliser. mais il faudra pour Lors en faire corriger le françois, sans en alterer le sens: (...) C'est par cette meme raison que j'ai envoieé une autre copie de ce papier à un autre de mes amis de Paris, & que je ne manquerais de multiplier s'il m'étoit possible dans si peu de tems de Le rependre par toute L'Europe. (...)

Este método foi publicado em Londres, em 1772, com o título «Directions for Impregnating Water with Fixed Air in order to communicate to it the peculiar Spirit and Virtues of Pyrmont Water». Magalhães sugeria na

sua carta a Trudaine a correção do francês que usara na sua tradução e pedia a sua divulgação.

Foi esta publicação de Priestley que maior curiosidade despertou em França, onde a necessidade de caracterizar as águas minero-medicinais fora requerida pelo Collège de Médecine a todos os médicos do país [5]. Magalhães comunicara anteriormente experiências feitas em Inglaterra sobre o «ar fixo», nomeadamente em cartas a Macquer (1771) [10].

A 7 de Julho de 1772 [11c], Magalhães informava Duchesne do sucesso das suas experiências:

«Je vous envoie ici, mon cher & bon ami, une nouveauté qui me semble fort utile au public. Je crois que vous ne serez pas fâché d'en avoir L'idée pour La communiquer à vos amis dans votre pais, où je crois que cette Lettre vous trouvera deja. Dans la poste derniere j'envoiai deux brochures angloises avec ce detail à M.^r Trudaine & une pour L'Academie Royale, dans Le Samedi je me suis mis à écrire quelques copies comme celle ci pour envoyer par La poste à diferentes amis, mais j'ai encore rendu hier cette operation un peu plus simple que celleci dans cette Lettre. J'en envoie par cette meme poste une copie manuscrite de ma derniere methode à Mons.^r Trudaine, & je souhaiterois qu'elle fut imprimée, après que le françois en seroit corrigé, & qu'on la repandit tout partout. (...)

A questão acima interessou a Trudaine, que escreveu a Lavoisier, a 14 de Julho [14], sobre o assunto, pedindo-lhe para repetir as experiências. Informava que iria também verificá-las, pois desde há três dias que o seu laboratório de Montigny estava pronto, e estava ansioso por se tornar um discípulo de Lavoisier:

«J'ai l'honneur de vous envoyer, Monsieur, une lettre que je recois de M. Magallhaens Anglois catholique correspondant de l'academie, au sujet d'une decouverte, tres importante Sur l'air fixe. j'y joins la petite brochure de M Priestley qui est parfaitement bien faite a ce qu'il m'a paru. j' imagine que vous entendez bien l'anglois. (o que de facto não era verdade; era M.^{me} Lavoisier quem fazia as traduções, devendo-se-lhe, por exemplo, a tradução do «Essai sur le phlogistique», de Kirwan) vous feriez une très bonne oeuvre très utile de faire publier cet ouvrage traduit avec les notes de M. Magallhaens. je vous prie aussi de vou-

loir bien repeter ces experiences, et d'ajouter vos propres observations. je vais repetter moi même ces experiences. (...) le merite de ces nouvelles decouvertes etant la promptitude j'espere que vous ne tarderez pas a faire paroistre ce petit ouvrage. il n'y aura pas de mal a en prendre un nombre d'exemplaires pour faire distribuer gratis, principalement aux medecins. dans le desir de donner satisfaction à M. Magalhaens j'ay cru ne pouvoir mieux m'adresser qu'a vous je Scais votre exactitude Sur les details de Phisique et de Chimie et je Scais que c'est vous obliger que de vous mettre a portée de faire une chose utile. (...)

Não há indícios que Lavoisier tenha repetido as experiências, mas leu, quatro dias depois, na Académie, a carta de Magalhães [7d].

Conforme referimos, Lavoisier também se interessou pela análise das águas, embora mais no sentido da sua adequabilidade para o consumo urbano.

Há, assim, elos comuns entre Magalhães e Lavoisier em torno da água. Magalhães não só divulgou as experiências de Priestley sobre este assunto, como contribuiu para o aperfeiçoamento de uma máquina de vidro para a produção de águas minero-medicinais gaseificadas [15], com a qual era possível produzi-las sem grandes gastos, num intervalo de tempo pequeno e em qualquer local (fig. 1).

Para além de ter apresentado as suas alterações à máquina de Nooth [16], para produção de águas artificiais, Magalhães debruçara-se anteriormente sobre a questão da destilação da água do mar e, também, de águas-ardentes.

Sobre as experiências de destilação da água do mar, sabe-se que

«a primeira ideia da Máquina destiladora que será objecto neste escrito, remonta ao ano de 1770. Executaram-se vários modelos diferentes em tamanho pequeno, & nomeadamente um no mês de Janeiro de 1773;» finalmente, pouco tempo depois, por ordem de «M. de Boynes, então Ministro da Marinha, a Máquina foi executada em Paris em ponto grande, (...) Esta Máquina foi então submetida a provas múltiplas, sob os olhares de vários Membros da Académie Royale des Sciences, de numerosas pessoas distintas pelos seus conhecimentos & pela sua categoria & o sucesso foi completo.» - «[1] M. Turgot, então Intendente de Limoges, actualmente Contrôleur-Général des Finances; M.



Trudaine, Conseiller d'Etat, Intendant des Finances; M. Montigny; M. Macquer; M. Leroy; M. Lavoisier; M. Desmarests, & plusieurs autres.»

Esta passagem foi publicada em 1781, anonimamente, no Journal de Physique [17] de Rozier e consta do prefácio de uma obra, extremamente rara de Magalhães, ambas intituladas «Nouvelle Construction d'Alambic pour faire toute sorte de Distillation en Grand avec le plus d'économie dans l'Opération, et le plus d'Avantage dans le Résultat, en deux parties; La première contenant son application à la distillation des Eaux-de-Vie; et la seconde à la dessalaison de l'Eau de la Mer à bord des Vaisseaux». Esta publicação saiu anónima, mas, o exemplar a que fazemos referência, existente em Leiden, tem manuscrito «par J. H. de Magellan» e «Ex dono authoris» (fig. 2) [4b, 18].

A 4 de Maio de 1772 [11d], em carta a Duchesne, Magalhães referia-se ao assunto dizendo:

«C'est mon cher ami, pour vous annoncer que J'ai Reussi dans Les Experiences pour faire une grande quantité d'eau douce, avec un apparatus fort aisé, de fort peu de volume: & peu de depense, à bord des vaisseaux. J'e n'ai pas osé me flater de son effet jusqu'à ce que mes experiences m'enconvainquirent. J'aieté plusieurs fois à bord de differents vaisseaux, & particulierement des deux qui sont destinés pour cette expedition de Mess.^{rs}. Banks & Solander, pour y observer tout ce qui pouroit etre utile & particulierement pour ce qui regardoit cet objet: & toutes les observations que

j'ai pu faire, jointes à mes tentatives & experiences, m'ont conduit à deceler cette methode precieuse: dont je vous prie de rendre part à M.^r Trudaine pour L'assurer du bon usage que je sais faire du donatif qu'il a eu La bonté de me faire en l'emploiant à des objets avantageux au service du public. Je pense aller tous-jours à Paris aussitôt que Je pourai me degager de mes petits engagements & arranger quelques petits affaires; (...).»

Na carta de 1 de Junho de 1772 [11e], prosseguia:

«Ayez la bonté mon cher ami, de lire les deux dernieres pages de cette lettre pour M.^r de Montigny: après celà vous la fermerez & la lui donnerez de ma part. il s'agit d'arranger les droits sur le eaux de vie: je m'entends sur ces matieres & puis dire de les connaitre à fond. si M.^r Trudaine le souhaite, je n'aurai le moindre difficulté d'aller à Paris, où je montrerai la methode la plus aisée & certaine de construire des instruments pour cet objet beaucoup meilleurs que ceux qu'on use en Angleterre dans les douanes: & dont j'envoie un à M.^r de Montigny qu'il me demanda: apparament c'est pour la compte de M.^r Trudaine. la caisse arrivera dans peu jours chez vous (...).»

A existência da versão impressa de Leiden permite esclarecer uma afirmação de Dumas, editor das «Oeuvres» de Lavoisier — «Cet ouvrage anonyme est l'oeuvre de Lavoisier; il porte son empreinte partout; à son époque, il était seul capable de l'écrire; le principe qu'il pose est le même principe qu'il appliquait bientôt au traitement du salpêtre: obtenir le maximum d'effet avec le minimum de dépense.» Grimaux [12b], um dos primeiros biógrafos de Lavoisier, baseado em Dumas, acusa de «abus de confiance» o aparecimento da memória no Journal de Physique, que considera ser de Lavoisier.

De facto, Lavoisier realizou também experiências para a dessalinização da água do mar, a pedido de Trudaine, para verificar a utilidade do alambique a que se referia Magalhães. Para isso, Lavoisier mandou e ecutar vários modelos. Grimaux refere que Turgot [19], que entretanto substituíra Boyne no Ministério da Marinha, decidira a colocação de um alambique num barco do rei, o que não veio a acontecer, porque também ele foi substituído.

Tendo terminado as experiências, Lavoisier escreveu uma pequena memó-

ria com os resultados, sabendo-se que na «miniatura autógrafa tem: A copier et à imprimer, ce 1^{er} juillet 1775» Lavoisier enviou uma cópia a Magalhães.

Magalhães referiu-se algumas vezes às experiências de dessalinização. Na carta a Duchesne, de 27 de Julho de 1773 [11f], considerava:

«Je souhaite bien savoir comment a Reussi M.^r Lavoisiere avec la desalution de l'eau Salée. (...).»

Um mês depois [11g], retomava a questão, admitindo que poderia ser útil na concretização das mesmas:

«Je serois bien Charmé de pouvoir faire un petit tour à Paris lors de votre retour. peut etre M.^r Lavoisiere seroit-il plus á meme de faire aler La machine pour faire l'eau douce de celle de la mer, avec plus de succès si je m'y trouvois &^s. Mais je crains ne pouvoir pas me débarasser aussitôt, d'une infinité de petis affaires qui me retient ici (...).»

Mas o seu desejo de ir a Paris, apresentava-se difícil de concretizar, pois, a 2 de Novembro de 1773 [11h], escrevia ainda:

«Je voudrois bien pouvoir faire un tour à Paris dans un ou deux mois d'ici: peut etre pourrions nous alors pousser les experiences de M.^r Lavoisiere, qui ne meritent pas de res [este bocado da carta está rasgado] donner cette petite lettre. (...).»

A 11 de Fevereiro de 1774 [13c], Magalhães escrevia a Lavoisier agradecendo-lhe o envio dos seus «Opuscules de Physique», onde este esclarecia que Venel não era o autor da descoberta do «ar fixo», fazendo justiça a Brownring e a Priestley e ultrapassando a questão que Magalhães tivera com Rozier sobre o mesmo assunto.

No seu recém-surgido «Journal de Physique», Rozier publicara a tradução do trabalho de Priestley sobre a impregnação das águas com «ar fixo», e estabelecera polémica com Magalhães relativamente às prioridades que Venel teria na identificação das propriedades do referido gás.

Na referida carta, Magalhães acrescentava:

«A present je me flate que vous poursuivez l'objet dela distilation & desalaison de l'eau de mer par la nouvelle methode; & je ne doute pas que cette entreprise n'acquiere pas quelques degres de plus grande perfection entre vos mains. Je pense aller à Paris au bout du mois prochain: & serai très charmé

Figura 2





na Académie. Terminava, indicando que Rozier as poderia publicar no «Journal de Physique», se assim o entendesse.

Não se conhecem cartas posteriores a esta data endereçadas a Lavoisier. Deste último, há uma carta de 30 de Abril de 1785 [20] em que Lavoisier recomenda a Magalhães o presidente de Virly, pedindo-lhe para o apresentar nos meios científicos.

Apesar de não existirem, tanto quanto é do nosso conhecimento, mais cartas de Magalhães para Lavoisier, e vice-versa, Magalhães não deixou de se interessar pelos temas que conduziram Lavoisier a um caminho novo para a química. Através de cartas dirigidas a outros amigos, sabe-se que as experiências efectuadas por Lavoisier e seus adeptos, relativas à calcinação dos metais e combustão em geral, continuaram a preocupar João Jacinto de Magalhães nos anos subsequentes e a servir de motivo de debate [21].

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Doutor Fernandes Thomaz a leitura crítica e sugestões oportunas.

NOTAS E REFERÊNCIAS

1. C.C., Gillispie: *Dictionary of Scientific Biography* - Lavoisier, art.º de Henry Guerlac, Charles Scribner's Sons, New York, 1981.
2. Maximiano de Lemos: *Estudos de História da Medicina Peninsular*, Porto, 1916.
3. Joaquim de Carvalho *Correspondência científica dirigida a João Jacinto de Magalhães*, Revista da Faculdade de Ciências, Universidade de Coimbra, **20** (1951) 93-283.
- 4a. Manuel Fernandes Thomaz, Isabel Maria Malaquias: *João Jacinto de Magalhães: a sua obra impressa e a sua correspondência científica*, *Revista da Universidade de Aveiro / Letras*, n.º 4-5, (1987/88) 7-56.
- 4b. idem, p. 23.
5. Noel G. Cole: *The preparation and uses of artificial mineral waters (ca. 1680-1825)*, *Ambix*, **31**, Part I (1984) p. 32-48.
6. Joseph, Priestley: *Directions for Impregnating Water with Fixed Air in order to communicate to it the peculiar Spirit and Virtues of Pyrmont Water*, London, 1772.
- 7a. Henry Guerlac, *Lavoisier - The Crucial Year*, Cornell University Press, Ithaca, New York, 1961, p. 51 - retirado do *Journal Book da Royal Society*.
- 7b. idem, p. 36-75.
- 7c. idem, p. 55.
- 7d. idem, p. 58-9 - Procès-verbaux, 91 (1772), fol. 254 verso.
8. Rómulo de Carvalho: «*Quatro cartas inéditas de João Jacinto de Magalhães*», comunicação na «João Jacinto de Magalhães Conference», Coimbra (1990) (para publicação nas Actas).
9. Jean-Charles-Philibert Trudaine de Montigny (1733-1777) era filho de Daniel Charles Trudaine (1703-1769), conhecido por «o grande Trudaine», que foi Conselheiro de Estado, Intendente Geral de Finanças e Director da Administração de Pontes e Estradas. Trudaine de Montigny, referido muitas vezes como «Mr. Trudaine», foi preparado pelo pai para lhe suceder. Teve um interesse mais profundo pela ciências e tecnologia do que o pai e maior do que as funções públicas que veio a exercer, requeriam que tivesse. A actividade pública de ambos foi notável. Em 1766, pretendeu que a Académie instituisse um prémio de 1200 libras, que disponibilizaria, com vista à distinção do melhor método de fazer vidro «flint», indispensável na construção de lentes acromáticas. O mesmo veio a ser atribuído por Luís XV; dada a importância do assunto. Outra contribuição importante de Trudaine, para a Académie, foi a aquisição de uma gigantesca «lente de queimar», por 15000 libras, conhecida por «lente de Trudaine». Esta lente foi usada por Lavoisier, e outros, em 1774.
- v.d. artigo de Ralph E. Oesper: «Priestley, Lavoisier, and Trudaine de Montigny», *Journal of Chemical Education*, **13** (1936) 403-412.
10. Cartas de Magalhães para Macquer de 4.5.1771, 20.8.1771, 5.10.1771 e 25.10.1771 - Bibliothèque Nationale, Paris, Ms. Fr. 12306.
- 11a. Archives Nationales, carton T 160¹⁰⁻¹², carta de 23.4.1771 para Duchesne.
- 11b. idem, idem, carta de 1.10.1771 - «*Vous auez deja lû que mon election en correspondant de l'Academie est deja faite: & je suis bien faché d'avoir manqué en partie notre bût: qui etoit d'avoir M. Coumiere pour Recevoir ma correspondance (...)*»
- 11c. idem, idem, carta de 7.7.1772.
- 11d. idem, idem, carta de 4.5.1772.
- 11e. idem, idem, carta de 1.6.1772.
- 11f. idem, idem, carta de 27.7.1773.
- 11g. idem, idem, carta de 27.8.1773.
- 11h. idem, idem, carta de 2.11.1773.
- 12a. Édouard Grimaux: *Lavoisier (1743-1794) d'après sa correspondance, ses manuscrits, ses papiers de famille et d'autres documents inédits*, deuxième édition, reimpressão pelas Éditions Jacques Gabay, 1992, p. 51.
- 12b. idem, p. 137-138.
- 13a. Archives Nationales, «Papiers de Lavoisier», Ms 1642 A, carta de 5.7.1772.
- 13b. idem, idem, Ms 1642 B, carta de 7.7.1772, carta para Trudaine de Montigny.
- 13c. idem, idem, Ms 1642 D, carta de 16.5.1774.
- 13d. idem, idem, Ms 1642 E, carta de 16.5.1774.
- 13e. idem, idem, Ms 1642 F, carta de 24.11.1774.
- 13f. idem, idem, Ms 1642 G, carta de 14.7.1775.
- 13g. idem, idem, Ms 1642 H, carta de 13.11.1775.
- 13h. idem, idem, Ms 1642 I, carta de 15.12.1775.
- 13i. idem, idem, Ms 1642 K, carta de 16.1.1776.
- 13j. idem, idem, Ms 1642 L, carta de 10.9.1776.
- 13k. idem, idem, Ms 1642, carta de 31.1.1777.
14. René Fric (ed.): *Oeuvres de Lavoisier - Correspondance*, Tome II (1770-1775), Paris 1957, p. 368-369. Carta de 14.4.1772 de Trudaine para Lavoisier. A mesma carta está publicada em H., Guerlac: op. cit. nota 7a, p. 57-58.
15. J. H. Magellan: *Description of a Glass-Apparatus for Making In a few Minutes, and at a very small Expence, the Best Mineral Waters of Pyrmont, Spa, Seltzer, Seydschutz, Aix-la-Chapelle, &c. together with the Description of two New Eudiometers, ... and the Method of using these Instruments, in a Letter to the Rev. Dr. Priestley...*, the third edition, London, MDCCCLXXXIII.
16. Após Magalhães ter divulgado o método de Priestley para produção de águas minerais artificiais, o construtor de instrumentos Blunt concebeu uma máquina para o efeito, tendo John Merwin Nooth, M.D., idealizado outra, menos perfeita, posteriormente, que Parker aperfeiçoou.
17. *Journal de Physique* (1781), Tome XVIII, Par. II, Juillet, p. 3-19 + 1 Planche; Aout, p. 85-103 + 3 Planches.
18. David Willemse: «Suites d'un voyage aux Pays-Bas - John Hyacinthe de Magellan et ses rapports avec J. H. van Swinden», *Arquivo do Centro Cultural Português de Paris da Fundação Calouste Gulbenkian*, volume VII, p. 225-278 (1973).
19. Anne-Robert-Jacques Turgot (1727-1781) foi ministro de Estado, «contrôleur général des Finances» e ministro da Marinha. Caracterizou-se pelo seu saber enciclopédico e apoio às ciências. Aconselhava-se frequentemente com cientistas, nomeadamente com Condorcet; patrocinou traduções de obras científicas e encorajou o trabalho dos inventores. Contribuiu para a «Encyclopédie» de Diderot e d'Alembert com um artigo intitulado «Expansibilité». A memória de Magalhães, sobre os octantes e sextantes ingleses, que foi impressa sob Privilégio da Académie Royale des Sciences, foi por este dedicada a Turgot.
20. Joaquim de Carvalho, op. cit. na nota 3, p. 253, refere-a como sendo de 1789, embora indique que esta surgiu, com data de 1785, no *Catalogue préliminaire de la Correspondance de Lavoisier*, elaborado por René Fric (1949). Esta carta pertence à Oxford Bodleian Library, Ms. Rigaud 38, fol. 116. Na edição de M. Goupil dos Fasc. IV das *Oeuvres de Lavoisier - Correspondance (1784-1786)*, de 1986, a carta é referida como sendo de 1785.
21. Isabel M. Malaquias, Manuel F. Thomaz, *John Hyacinth de Magellan and the Phlogiston Theory*, comunicação na «João Jacinto de Magalhães Conference», Coimbra (1990) (para publicação nas Actas).

* Departamento de Física
Universidade de Aveiro

Alguns aspectos químicos do odor

FERNANDA M. C. PEIXOTO*

A geometria das moléculas que constituem um composto, é a principal característica responsável pelo odor por ele exalado. O sistema olfativo é constituído por células receptoras de vários tipos. Cada uma representa um odor distinto, possuindo tamanho e forma específicos. As moléculas odoríferas, com a sua geometria própria, encaixam nestes receptores permitindo assim que o seu odor seja sentido. Se uma molécula encaixar apenas num receptor, esta exalará um odor primário, mas se encaixar ao mesmo tempo em vários receptores, libertará um odor mais complexo. É possível através de combinações adequadas sintetizar qualquer odor. O cheiro provocado pelo corte de um alho ou de uma cebola, deve-se à existência de compostos de enxofre nestes bolbos. Os compostos extraídos de um alho e de uma cebola dependem das condições de extracção e são usados desde a antiguidade na prevenção e cura de várias doenças.

ESTEREOQUÍMICA DO ODO

A percepção do cheiro baseia-se na geometria das moléculas. O nariz diferencia facilmente os cheiros através de um receptor adequado, que existe nos terminais dos nervos olfativos. Se forem estimulados por moléculas odoríferas, estes enviam sinais ao bulbo olfativo e daí ao cérebro, onde estes são integrados e interpretados em termos de carácter e intensidade.

Para que uma substância produza cheiro, deve possuir determinadas propriedades: volatilidade, solubilidade em água (uma substância totalmente insolúvel em água não atingirá os terminais do nervo olfativo) e solubilidade em lípidos (permitindo-lhe penetrar os terminais do nervo olfativo através das camadas de lípidos que fazem parte da membrana de cada célula).

Foram sintetizados vários compostos na tentativa de descobrir o mecanismo do odor, tendo sido feitas algumas descobertas importantes:

— a adição de uma ramificação a uma cadeia de átomos de carbono, em molé-

culas com cheiros característicos, aumenta consideravelmente a intensidade do seu odor;

— os odores fortes estão associados em geral, a cadeias de quatro a oito átomos de carbono nas moléculas de certos alcoóis, aldeídos e compostos de enxofre;

— dois isómeros ópticos têm cheiros diferentes;

— no benzeno, mudando a posição de um grupo de átomos, associado ao anel, modifica-se o cheiro do composto;

— se a molécula for muito grande, os átomos podem ser reordenados consideravelmente sem se alterar o seu cheiro.

Com estas descobertas os químicos concluíram que o factor determinante do odor da substância, deveria ser a sua forma geométrica no seu todo e não detalhes relativos à sua composição e estrutura.

Em 1949, surgiu uma teoria para explicar o funcionamento do sistema

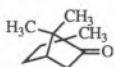

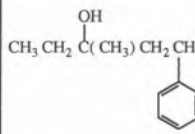
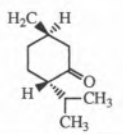
olfativo. Segundo esta teoria, este sistema é composto por células receptoras de tipos diferentes. Cada uma representa um odor distinto e as moléculas odoríferas produzem os seus efeitos encaixando nestas células. Esta é uma aplicação do modelo "chave/fechadura", conceito que provou ser útil na explicação da interacção das enzimas com os seus substratos.

Verificou-se que determinados odores são reconhecidos com muito mais frequência do que outros, surgindo por isso uma classificação em primários e secundários. Por exemplo, foram encontrados mais de cem compostos com cheiro a cânfora e cerca de meia dúzia, com cheiro a óleo de cedro. Isto sugere que o primeiro seja primário e que o segundo seja secundário.

Por este teste de frequências, foi possível seleccionar sete odores que se tomam como primários:

A partir destes sete odores primários, poderia obter-se qualquer outro

QUADRO 1

Odor	Exemplo	Substância familiar	Estrutura
Canforoso	Cânfora	Naftalina	
Almiscarado	Pentadecanolactona	Óleo de raiz de angélica	
Floral	1-fenil-3-metil-3-pentanol	Rosas	
Hortelã-pimenta	<i>l</i> -mentona (levógiro)	Rebuçados de hortelã	
Etéreo	1,2-dicloroetano	Produtos de limpeza a seco	$\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$
Pungente	Ácido fórmico	Vinagre	HCOOH
Pútrido	Butilíol	Ovo choco	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SH}$

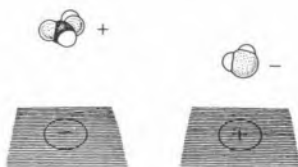
conhecido juntando-os em determinadas proporções.

Uma vez que há sete odores primários, deverá haver sete espécies diferentes de receptores olfactivos no nariz. Cada receptor aceitará uma molécula de configuração apropriada tal como uma ficha encaixa numa tomada. No entanto, algumas moléculas são capazes de encaixar em dois ou mais receptores diferentes e neste caso a molécula terá um cheiro mais complexo.

Para estudar as formas dos receptores, começou-se por examinar as fórmulas estruturais dos compostos canforosos, construindo os modelos das suas moléculas. Concluiu-se que tinham forma esférica e verificou-se que o receptor para este odor possuía forma semi-esférica. Estudos feitos em relação a outros odores primários, permitiram concluir que o cheiro almiscarado é devido a moléculas em forma de disco; o odor floral é causado por moléculas que têm forma de um disco com uma cauda flexível (como um papagaio de papel); o odor hortelã-pimenta é produzido por moléculas com forma de cunha e com um grupo de átomos polarizados electricamente, capazes de formar uma ligação de hidrogénio e o odor etéreo é devido a moléculas com forma de ponteiro. Em cada um destes casos os receptores têm forma e tamanho correspondentes (fig. 1):

Os odores pungente e pútrido, parecem ser excepção a esta interpreta-

ção. O importante nestes dois casos, é a carga da partícula que vai penetrar no receptor: o cheiro pungente é produzido por compostos cujas partículas odoríferas têm carga positiva e o odor pútrido é causado por aquelas que têm excesso de electrões (Fig. 2):



Pelo que atrás foi dito, a partir de uma fórmula molecular, deveremos ser capazes de prever o seu odor: se uma molécula preencher apenas um receptor de forma e tamanho determinado, deverá apresentar um odor primário na sua forma pura; se a molécula encaixar em vários tipos de receptores, terá um odor composto pelos odores em cujos receptores encaixa. Se nesta molécula houver a substituição de um grupo, que a impeça de encaixar num dos receptores anteriores, para passar a encaixar noutro, deverá apresentar um cheiro diferente. Podemos pensar então que, através dos odores primários, é possível sintetizar um odor complexo.

Descobriu-se que os produtos químicos que exalam odor a óleo de sândalo, que não era considerado primário, tinham formas que se ajustavam aos

receptores para os odores canforoso, almiscarado, floral e hortelã-pimenta. Foram tentadas várias combinações destes quatro odores primários para obter o óleo de sândalo e depois de muitas tentativas, produziu-se uma mistura que possuía realmente o cheiro deste óleo.

Apesar do que foi dito, deve ter-se em atenção que a relação entre a estrutura molecular dos osmóforos e a sua qualidade olfactiva é um problema ainda não completamente esclarecido. Os próprios mecanismos da percepção olfactiva estão ainda longe de estar compreendidos.

A QUÍMICA DO ALHO E DA CEBOLA

O cheiro, intenso e desagradável provocado pelo corte de um alho ou de uma cebola, deve-se aos compostos de enxofre neles existentes. O grande interesse pela química do alho e da cebola deve-se não só ao cheiro que estes exalam, mas também às suas aplicações clínicas.

O alho e a cebola são membros da família dos lírios. Os seus nomes botânicos são *Allium sativum* e *Allium cepa*. *Allium* deriva da palavra Celta, "all", que significa pungente. Tanto um como outro, eram plantas cultivadas na antiguidade e as suas origens vêm da Ásia Central.

Há milhares de anos, o alho e a cebola fizeram parte da medicina popular. Um papiro médico egípcio, datado de cerca de 1550 anos a. C., descreve mais de oitocentas formas de terapêutica das quais, vinte e duas caracterizam o alho

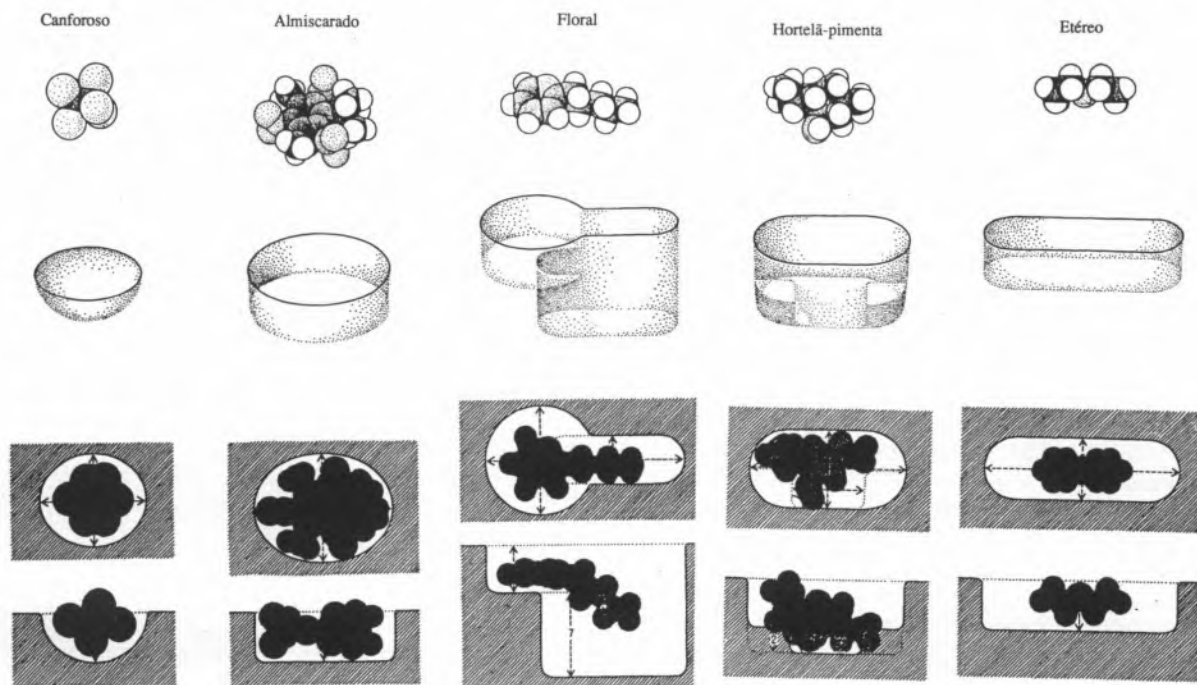


Fig. 1

como um remédio eficaz para uma variedade de doenças, tais como problemas de coração, dores de cabeça e tumores.

Não eram só os egípcios que atribuíam grande valor aos seus efeitos medicinais:

- O naturalista romano Plínio o Antigo, descreveu numerosos usos terapêuticos tanto para o alho como para a cebola.
- Dioscórides, médico chefe do exército romano, no primeiro séc. d. C. receitou o alho como provocador de vômitos para expelir parasitas.
- Durante os primeiros jogos Olímpicos na Grécia, o alho foi ingerido como estimulante.
- Na Índia o alho tem sido utilizado como loção anti-séptica para lavar feridas e úlceras.
- Na China, o chá de cebola tem sido recomendado para a febre, dor de cabeça, cólera e desintéria.
- Em 1721, diz a história, quatro criminosos condenados foram recrutados para enterrar os mortos durante a praga de Marselha. Verificou-se que estes homens estavam imunes à doença. O seu segredo estava numa bebida que eles preparavam que consistia em vinho com alho esmagado.
- Em 1958, Louis Pasteur referiu que o alho é anti-bacteriano e mais recentemente Albert Schweitzer utilizou o alho, em África, para o tratamento da desintéria.
- Nas duas Guerras Mundiais, o alho foi utilizado como anti-séptico para prevenir a gangrena.
- Investigações de laboratório mostram que o sumo de alho diluído inibe o crescimento de bactérias.
- Na Índia, publicaram-se os resultados de um estudo de epidemias em três populações que consumiam quantidades diferentes de alho e de cebola. Verificou-se que o grupo dos que não consumiam alho e cebola, apareceu num curto intervalo de tempo com coágulos sanguíneos.

Muitos trabalhos de investigação foram efectuados, na tentativa de interpretar os efeitos do alho e da cebola.

Um dos primeiros estudos químicos foi realizado em 1844 pelo físico alemão, Theodor Wertheim. Wertheim colocou alho em água a ferver e através de uma destilação conseguiu pequenas quantidades de um óleo de alho. Da destilação deste óleo obtiveram-se algumas substâncias voláteis com cheiro intenso. Foi proposto, por este cientista, o nome alilo (allyl-alho) para o grupo de hidrocarbonetos existente no alho e sulfureto de alilo para as subs-

tâncias voláteis. Há muitos compostos com o grupo alilo, $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, que apresentam um odor forte.

Em 1892, outro investigador alemão, o químico F. W. Semmler, conseguiu retirar por cada kg de alho, 1 ou 2g de um óleo mal cheiroso. Este óleo continha em grande quantidade uma substância chamada dialildissulfureto, $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{SSCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, e em menor quantidade, dialiltrissulfureto e dialitetrassulfureto (eq. a.).

Mais tarde, em 1944, J. Cavallito e os seus colegas em N.Y., descobriram que os compostos de enxofre extraídos do alho e da cebola dependem das condições de extração. Cavallito utilizou álcool etílico como solvente, à temperatura ambiente, e obteve uma substância de fórmula química $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{S}_2\text{O}$, a alicina (eq. b.).

Provou-se que esta substância era anti-bacteriana e fungicida, sendo até mais forte do que a penicilina ou a sulfaguanidina contra *B. typhosus*. A alicina é um líquido quimicamente instável, sem cor e explica melhor do que o dialildissulfureto, o cheiro do alho. Apesar da alicina ser a responsável pelo cheiro do alho, um bolbo intacto não exala qualquer cheiro.

Em 1948, Arthur Stoll e Ewald Seebeck, explicaram como é que a alicina se desenvolve no alho: o corte ou esmagamento dá origem a uma enzima chamada alinase que actua numa substância sem cheiro, a aliina, que constitui cerca de 24% do peso de um bolbo de alho. A aliina pode ser extraída do alho em condições suaves (eq. c.).

Sob a influência da aliinase, a aliina decompõe-se em ácido 2-propenossulfénico (fig. 2).

Paralelamente ao interesse pela química do alho, havia também o interesse pela química da cebola. Os compostos de enxofre extraídos da cebola, também dependem das condições de extração. A destilação por arrastamento de vapor, liberta um óleo que contém propanal e dipropildissulfureto (eq. d.);

Utilizando como solvente freon misturado com água, à temperatura de 0°C, obtém-se o factor lacrimogénio, em que predomina o isómero *syn* (eq. e.).

Em 1961, o bioquímico finlandês Artturi Virtanen mostrou que as cebolas contêm sulfóxido de trans(+)-S-(1-propenil)-L-cisteína que é um isómero posicional da aliina. A sua estrutura difere apenas na posição da dupla ligação (eq. f.).

Esta substância (P.F.L.) é o

precursor do factor lacrimogénio. Tal como a aliina, no alho, também pode ser extraído da cebola em condições suaves (eq. g.).

A enzima aliinase da cebola, converte-o no factor lacrimogénio ($\text{C}_3\text{H}_6\text{S O}$) que é a substância que faz chorar as pessoas quando cortam uma cebola (eq. h.).

Portanto, no alho, a aliinase converte a aliina em alicina que é o seu constituinte odorífero. Na cebola a enzima converte o precursor lacrimogénio (a) no factor lacrimogénio.

Muitos outros trabalhos de investigação foram realizados. Nestes, estudaram-se as reacções em que o metilmetanotiosulfinato, $\text{CH}_3\text{S(O)SCH}_3$, que é o homólogo mais simples da alicina, intervém. Este pode decompôr-se em ácido metanossulfénico e tioformaldeído. Pode também auto-condensar-se para produzir o 2,3,5-tritiahexanossulfóxido.

Mais tarde este trabalho provou ser importante na elucidação da estrutura e modo de formação das características antitrombóticas do alho. Na Venezuela produziram-se vários extractos de alho que foram particularmente activos na prevenção de coágulos de sangue. O extracto mais activo, tinha a fórmula química $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{S}_3\text{O}$. Estabeleceu-se a estrutura deste composto, como sendo: $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{S(O)CH}_2\text{CH}=\text{CHSSCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ e atribuiu-se-lhe o nome de ajoeno (ajo do espanhol, alho).

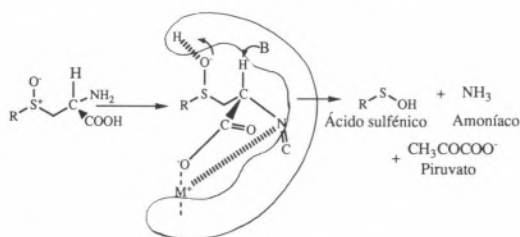
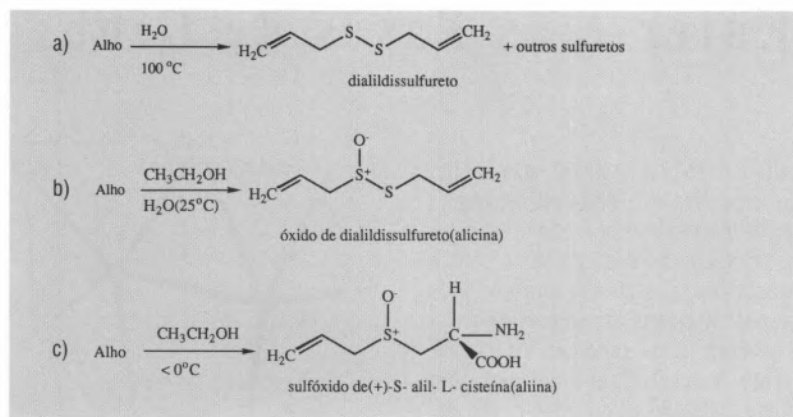
O primeiro trabalho na auto-condensação do metilmetanotiosulfinato sugeriu que o ajoeno se forma pela auto-condensação da alicina (eq. i).

Algumas experiências mostraram que o ajoeno como agente antitrombótico, é pelo menos tão forte como a aspirina. Certos estudos sugerem que o ajoeno actua pela inibição dos receptores de fibrinogénio nas plaquetas. Assim, haverá uma inibição dos grupos -SO e -SS- do ajoeno com grupos quimicamente complementares à superfície das plaquetas os quais podem ligar-se ao fibrinogénio.

A importância das propriedades químicas e biológicas do alho e da cebola é indiscutível e continuam a aparecer trabalhos sobre as suas propriedades anticoagulantes.

REFERÊNCIAS

- J. E. Moore, J.W. Johnston, Jr. and M. Rubin, *Organic Chemistry of Life*, Readings from Scientific American, W. H. Freeman and Company, San Francisco, nº 12 (1973) 94.



T. P. Coultate, *Food, The Chemistry of Its Components*, Royal Society of Chemistry Paperbacks, (1989)175.

E. Bloch, *Sci. Amer.* **252**(3) (1985) 114.

Outras referências com interesse:

A. Holley, "La perception des odeurs", *La Recherche*, **6** (58) (1975) 629.

J. R. Whitaker, "Development of flavor, odor, and pungency in onion and garlic", *Adv. Food Res.*, **22** (1976) 73.

J. F. Carson, "Chemistry and Biological Properties of Onions and Garlic", *Food Rev. Int.*, **3** (1987) 71.

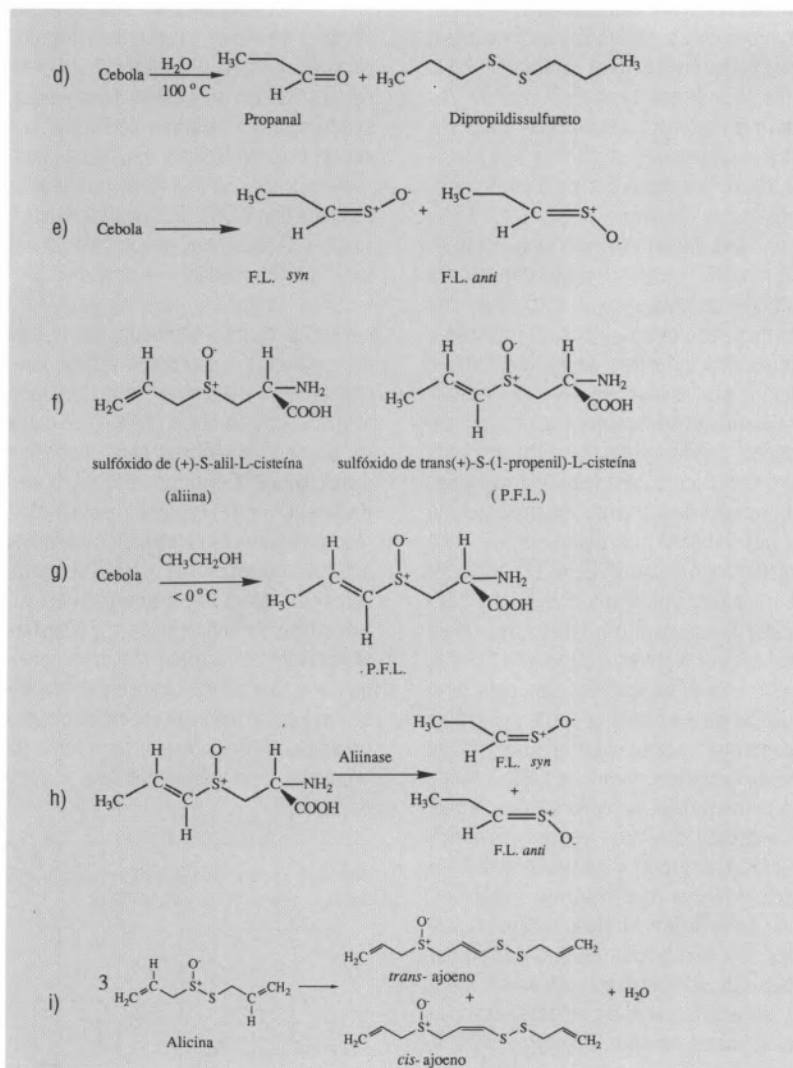


Fig. 3 - Se o radical R for o grupo alilo, o substrato é a aliina. Um cofator de fosfato de piridoxal actua no substrato de tal modo que forma, com a enzima, um complexo. A ligação inclui uma interação electrostática do substrato e um ião metálico (M⁺). Um grupo básico, B, existente na enzima remove um próton do substrato e liberta-se ácido sulfénico (R-S-OH), amoníaco (NH₃) e piruvatos (CH₃COCO₂⁻).

Y. Morimitsu, Y. Morioka and S. Kawakishi, "Inhibitors of Platelet Aggregation Generated from Mixtures of Allium Species..." *J. Agric. Food Chem.*, **40** (1992) 368.

Ruth Winter, *Le Livre des Odeurs*, Editions du Seuil, Paris, 1985.

Robert Tisserand, *Aromatherapy for Everyone*, Penguin Books, London, 1988.

Diane Ackerman, *A Natural History of Senses*, Random House, New York, 1990.

P. W. Atkins, *Molecules*, Scientific American Library, New York, 1990.

Perfumery. The Psychology and Biology of Fragrance, ed. by Van Toller and G. H. Dodd, Chapman and Hall, London, 1991.

W. C. Agosta, *Chemical Communication*, Scientific American Library, New York, 1992.

H. Boelens, H. G. Haring, H. J. Takken, "The influence of molecular structure on olfactive quality (a quantitative approach)", *Chem. Ind.*, 3rd January (1983).

E. Polak, "Is odour similarity quantifiable?", *Chem. Ind.*, 3rd January (1983).

S. S. Schiffman, "Future design of flavour molecules by computer", *Chem. Ind.*, 19th September, 1988.

AGRADECIMENTOS:

Agradeço o apoio prestado durante a preparação deste trabalho aos Drs. Ana Maria Campos, Maria João Queiroz e Mário Rui Rebelo, do Departamento de Química da Universidade do Minho.

*Escola C+S de Tadim - 4º Grupo A - BRAGA

O Poliedro de Euler e as Fases de Gibbs

LIONELLO POGLIANI*

Ou melhor, as faces de Euler e as fases de Gibbs. Mostra-se como uma escolha apropriada dos termos permite obter o poliedro de Euler a partir das fases e dos componentes de Gibbs (e vice-versa). Mostra-se também que os poliedros estão para os diagramas de fase como um cubo está para o seu equivalente bidimensional e como é possível obter o número ciclomático com a regra de Euler.

INTRODUÇÃO

J. W. Gibbs (1839-1903) definiu a fase de um sistema químico-físico simples (isto é, um sistema sem campos magnéticos, eléctricos ou gravitacionais) como um estado da matéria uniforme seja na sua composição química seja no seu estado físico [1] e definiu também o número de componentes C do sistema como o número mínimo de espécies independentes necessárias para definir a composição de todas as fases F presentes no sistema e demonstrou de maneira muito elegante que o número de variáveis independentes V de um sistema de F fases e C componentes delimitados pelas duas variáveis (temperatura e pressão) que definem o potencial químico de cada componente das F fases é dado pela famosa regra das fases:

$$V = C - F + 2 \quad (1)$$

MÉTODO

Se definirmos, de maneira um pouco unilateral, a face F de um sistema poliédrico simples, como o poliedro da figura 1 (um poliedro simples é um poliedro sem buracos de maneira que a sua superfície possa ser transformada por uma série de deformações contínuas na superfície de uma esfera) como um estado geométrico uniforme bidimensional e o número das conexões C desse mesmo sistema como o número mínimo de lados necessários para definir o conjunto de todas as faces, e se além disso definirmos os vértices V do sistema poliédrico simples como o número de variáveis desse mesmo sistema constituído por F faces e por C conexões delimitadas pelos dois vértices que definem

cada um dos lados das F faces, então por uma simples questão de paralelismo formal para que esse estranho 'isomorfismo' (verdadeiro isomorfismo seria a exacta correspondência entre os dois grupos (variáveis, fases, componentes) e (vértices, faces, conexões) e a possibilidade de resolver os problemas num grupo utilizando os correspondente elementos isomorfos do outro grupo) seja perfeito deve valer também para os poliedros simples a seguinte regra, a que chamaremos regra dos poliedros:

$$V = C - F + 2 \quad (2)$$

RESULTADOS

Se a regra 1 nos diz que o número de fases de um sistema físico-químico simples nunca poderá superar o número dos componentes mais as duas variáveis que os definem, também a regra 2 nos diz que o número das faces de um poliedro simples nunca poderá superar o número de conexões mais os dois vértices que as definem.

Ora, como este estranho "isomorfismo" foi artificialmente construído através de uma escolha apropriada dos termos, ocorre-nos a suspeita de que a regra dos poliedros possa ser falsa e que a sua validade no caso da Figura 1 seja simplesmente uma estranha coincidência devido à forma peculiar do poliedro escolhido e nada mais. Na realidade, a regra é não somente verdadeira como a sua validade foi demonstrada pelo matemático suíço L. Euler (1707-1783) um século antes que J.W. Gibbs obtivesse a sua regra das fases. Experimente-se, com o poliedro da Figura 1, introduzir uma nova conexão entre dois vértices ou eliminar uma já existente: a regra continua a ser obedecida (um método semelhante foi utilizado por Euler para a demonstrar). Essa estranha concordância formal das duas regras (conhecia Gibbs essa regra? Suspeitava da sua utilidade formal para resolver o problema das fases?) tem intrigado muitos cientistas; os dois grupos de V , C e F , porém, não são isomorfos e todas as tentativas para encontrar uma relação entre as duas regras falharam até hoje.

E tudo poderia acabar aqui, com

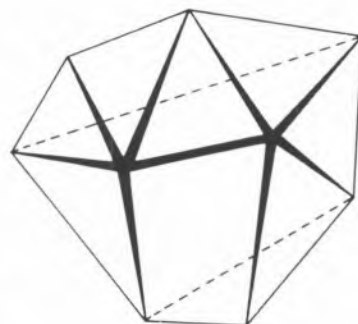
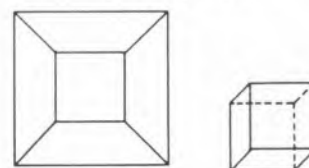


Figura 1: um poliedro simples para o qual se verifica a regra dos poliedros: $V = 18 - 11 + 2 = 9$.

essa estranheza 'isomórfica', mas na verdade alguns químicos utilizando a teoria dos grafos [2] chegaram a alguns resultados químicos interessantes partindo da fórmula de Euler dos poliedros simples, ou melhor, partindo dos grafos planares. A teoria dos grafos é uma teoria baseada em elementos de topologia, sendo esta um ramo da geometria que estuda as propriedades das figuras geométricas que se mantêm quando as mesmas figuras são submetidas a deformações tão grandes que façam alterar todas as propriedades métricas e projectivas (a topologia é vulgarmente conhecida como a geometria das figuras de borracha); o pai desse tipo de geometria foi o astrónomo e matemático alemão A. F. Moebius (1790-1868), que os químicos quânticos bem conhecem devido a um objecto geométrico, o anel de Moebius, que acabou por se transformar também num objecto de cálculos de orbitais moleculares [2,3]. Vejamos antes de mais o que é um grafo planar. Um poliedro simples pode ser transformado num certo grafo planar simplesmente achatando-o num plano de maneira a preservar todas as conexões e todos os vértices (deformação permitida em topologia) como acontece com o cubo da Figura 2.

Figura 2: cubo achatado bidimensionalmente para dar o correspondente grafo planar



Os grafos planares, descobertos por Euler, ao perderem uma face (imagine-se um cubo de borracha oco; se cortarmos uma face desse poliedro vazio poderemos deformar a sua superfície até deitá-lo completamente sobre um plano) verificam a seguinte regra:

$$V = C - F + 1 \quad (3)$$

Na verdade, topologicamente falando, a regra (2) continua a valer se a face que desapareceu é uma face levada ao infinito, isto é, uma face que se transformou no espaço externo do grafo planar. Se considerarmos, porém, somente o reticulado do grafo planar a regra (3) é de utilidade mais directa, como veremos em seguida.

O diagrama de fases da Figura 3a, por exemplo, pode ser visto como um grafo planar G , e como tal pode ser transformado no correspondente grafo dual G^* , isto é: se cada região do diagrama de fases, incluindo o seu exterior, for representada por um vértice V^* , e se duas regiões do diagrama de fases possuem uma conexão C em comum, então os correspondentes vértices V^* podem ser ligados por uma conexão C^* (Figura 3b) e o grafo assim resultante, Figura 3c, é o grafo dual do diagrama de fases, obedecendo esse grafo dual à regra (3), pois:

$$C^* = 10, F^* = 6 \text{ e } V^* = 5$$

Representados como grafos duais, os diagramas das fases podem ser facilmente memorizados e tratados em computador. Deixa-se ao leitor como exercício a obtenção do grafo dual do diagrama de fases da Figura 4.

A fórmula (3) tem porém uma utilidade ainda mais ampla em Química, especialmente em Química Orgânica. Considerando uma estrutura química sem hidrogénios (hydrogen suppressed graph) como um grafo planar (as fórmulas estruturais que estamos habituados a desenhar para moléculas orgânicas) e pondo: $R = F$ (R =rings), número de anéis; $A = V$, número de átomos, e $B = C$ (B =bonds), número de ligações, obtemos, por simples rearranjo da regra (3), o chamado o número ciclomático (cyclic number) R ou seja, o número de anéis:

$$R = B - (A - 1) \quad (4)$$

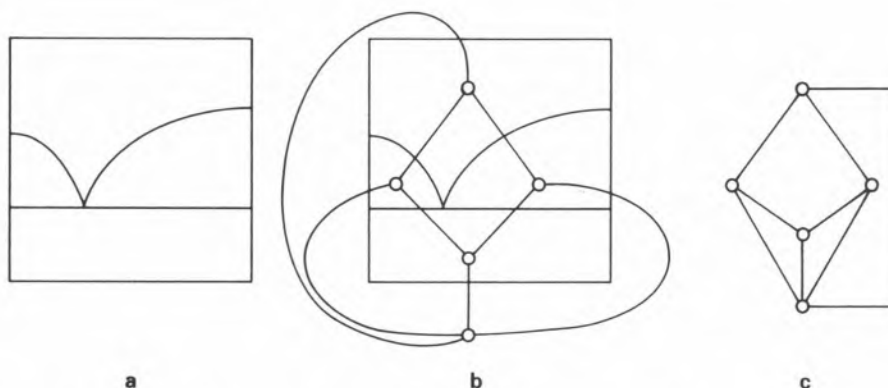


Figura 3: (a) um diagrama de fases, (b) o diagrama de fases com o grafo dual sobreposto, (c) o grafo dual do diagrama de fases.

Para um sistema acíclico $B = A - 1$ e, claramente, $R = 0$, enquanto que em sistemas condensados conhecendo B e A podemos determinar R . A regra (4) tem sido a base para demonstrar a validade geral de uma série de regras que são utilizadas no processo de 'inverse imaging' [4] para reconstruir estruturas químicas a partir das suas propriedades gráficas [5-7]. Por exemplo, a seguinte regra

$$B_{\max} = A - [n(\text{Me}) - 1] \quad (5)$$

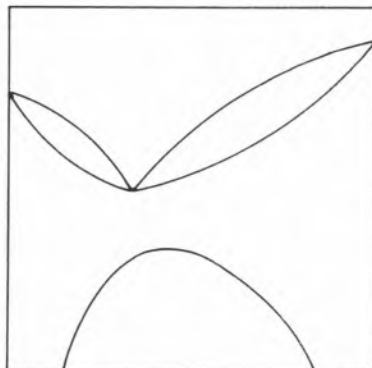
dá-nos o número máximo de ligações, B_{\max} , existentes no caminho mais longo possível de um grafo molecular cujo número de átomos de carbono é A e cujo número de grupos metílicos é $n(\text{Me})$.

Exemplo: $C_5(\text{Me})_7$, $B_{\max} = 6$.

CONCLUSÃO

Se a regra das fases de Gibbs não tem utilidade em geometria, pois a geometria nada tem a ver com fases, componentes químicos e variáveis termodinâmicas, já a regra dos poliedros de Euler, como acabamos de ver, é útil em Química, pois estruturas químicas muito diversas, como um diagrama de fases e

Figura 4: determine-se o grafo dual do seguinte diagrama das fases, visto como um grafo planar.



uma fórmula molecular, podem ser igualmente vistas como conjuntos de vértices, conexões e faces.

Para concluir este artigo sobre uma tão curiosa mas útil coincidência entre geometria e química, nada melhor do que mencionar uma outra aproveitável coincidência entre letras do alfabeto, números e propinas: *sim, e como é lindo finalizar um pesado curso que custa propinas terríveis remidas estudando = 3,14159265358979* que são os primeiros 15 algarismos do número π (transforme-se cada palavra no correspondente número de letras) que pode ser utilizado para produzir números aleatórios, tendo esse primeiros 15 números uma média de 5,1 e um desvio padrão de 2,8.

BIBLIOGRAFIA

1. P. W. Atkins, *Physical Chemistry*, 3rd ed., Oxford University Press, Oxford, 1987.
2. N. Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, CRC Press, Boca Raton FL, 1983.
3. M. J. S. Dewar, R. C. Dougherty, *The PMO Theory of Organic Chemistry*, Plenum Press, New York, 1979.
4. L. B. Kier, L. H. Hall, J. W. Frazer, *J. Chem. Inf. Comp. Chem.*, **33** (1993) 143, 148.
5. N. J. Turro, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **25** (1986) 882.
6. P. J. Hansen, P. J. C. Jurs, *J. Chem. Educ.*, **65** (1988) 574.
7. L. Pogliani, *Chemistry and Properties of Biomolecular Systems*, N. Russo et al. (eds), Vol. 2, Kluwer, Dordrecht, 1993.

*Centro de Química-Física Molecular, Instituto Superior Técnico, 1096 Lisboa Codex. Em gozo de licença sabática do Departamento di Chimica, Università della Calabria, 87030 Rende (CS), Itália.

Qualidade e Certificação Os Laboratórios Acreditados

Iniciámos, no último *Química*, a publicação de um trabalho acerca da Qualidade e Certificação, referindo-se aí o porquê da "luta" pela sua obtenção por parte de empresas, nomeadamente do sector químico. Neste número, e porque sem tal esta análise ficaria profundamente incompleta, iremos referir o papel dos Laboratórios neste processo, sendo que, com certeza, uma grande parte dos nossos leitores se identificará com estas questões dada a sua actividade profissional.

Em primeiro lugar, convirá ter presente a nomenclatura própria utilizada, muitas vezes confundida e aplicada indistintamente. Assim, por Laboratórios Acreditados entendem-se aqueles a que foram reconhecidas competências para o desempenho de determinadas funções, normalmente as relativas à análise de produtos, bens e serviços. Já a certificação propriamente dita visa demonstrar a conformidade de um Sistema de Qualidade implantado numa empresa e aplicado, naturalmente, aos produtos, bens e/ou serviços por esta oferecidos, tendo como fundo de comparação normas específicas que neste campo existem a nível nacional e comunitário. Ou

seja, acreditam-se entidades (laboratórios, organismos sectoriais...) e certificam-se empresas e os seus Sistemas de Qualidade. Esta acreditação, aliás como na grande maioria dos casos de certificação, é conferida *maxime* pelo Instituto Português da Qualidade.

Este processo encontra-se cada vez mais justificado entre nós, na medida em que os empresários e industriais, a par dos organismos governamentais, face aos já de si intrincados condicionamentos económicos com que se deparam, estão também mais despertos para a necessidade de se "armarem" de todos os trunfos ao seu alcance para atingirem, com sucesso, uma plena competitividade. Quer ao nível do comércio interno, quer ao do externo, já é um dado adquirido que um produto, bem ou serviço não se "vende" apenas com recurso, por exemplo, às tradicionais técnicas de *marketing*. As garantias de Qualidade são assim um "trampolim" para uma boa colocação e escoamento desses produtos no mercado.

Neste quadro, a uma empresa interessa não só ter e aplicar sistemas de qualidade reconhecidos, que lhe atribuem maior "credibilidade", como também

que esta actuação se processe ainda a outros níveis, como seja, no caso das empresas que os possuem, a própria acreditação dos seus laboratórios, ou o recurso, com segurança igualmente reconhecida, a laboratórios terceiros que atestem a qualidade dos seus produtos.

Esta situação é bem traduzida no número crescente de Laboratórios Acreditados, quer aos que já o são de facto, quer mesmo quanto àqueles que já iniciaram esse processo. Assim, os primeiros Laboratórios Acreditados datam de 1986 (3), sendo, actualmente, cerca de uma centena, divididos entre Laboratórios de Ensaio Acreditados e Laboratórios de Calibração Acreditados, cobrindo praticamente todos os sectores de actividade, desde os géneros alimentícios aos aparelhos de medição.

Pelos depoimentos recebidos, e a fim de não tornarmos este texto introdutório demasiado longo, pensamos que ficará dada uma larga panorâmica de como se desenrolam as actividades destes Laboratórios, todos eles especialmente ligados, pela sua natureza, ao sector químico.

H.P.C.

O Mercado Interno Europeu e os Laboratórios Acreditados

TOSCANO RICO*

No que diz respeito à atribuição de competências, convém localizar a situação actual, que advém da evolução das decisões comunitárias dos últimos anos.

É sabido que o Mercado Interno Europeu tem como grande objectivo a livre circulação de pessoas e bens. Até 1985, o princípio orientador da acção da Comunidade, para efeito de eliminação de entraves às trocas e garantia total da livre circulação dos produtos, estabelecida no Tratado de Roma, foi o da harmonização das legislações dos Estados-membro, através das Directivas comunitárias.

No entanto, existiam no artigo 36.º algumas derrogações, com vista à defesa da saúde e da segurança do consumi-

dor e que eram aproveitadas por cada país no sentido de criar restrições que defendessem os seus próprios produtos. Isto levou a que se continuassem a verificar, no Mercado Interno, inúmeros obstáculos ao comércio.

Em Maio de 1985, o Conselho das Comunidades adoptou uma nova abordagem em relação à harmonização técnica e à regulamentação e que se baseia nos seguintes princípios:

- A normalização pode e deve ser factor de harmonização do mercado e elemento de competitividade;

- No domínio da segurança, saúde e protecção dos consumidores, os objectivos dos vários Estados-membros

são, no essencial, equivalentes.

Foi, assim, definida pela Comissão uma "nova abordagem" para elaboração de legislação comunitária, com o objectivo de harmonizar normas e regulamentos técnicos, especialmente no que se refere às trocas comerciais de géneros alimentícios, que ocupam um lugar de importância primordial neste mercado.

Esta "nova abordagem", ao visar também a harmonização total do mercado, implica o princípio de que ensaios e certificações feitos em cada Estado-membro, e de acordo com as Normas CEN, são comparáveis e aceites mutuamente. Assim, e com base na "abordagem global", basta só um certificado

Laboratórios Químicos e afins acreditados

LABORATÓRIOS DE ENSAIOS ACREDITADOS EM 93.10.13

NORMA DE REFERÊNCIA: NP EN 45 001 – Critérios gerais para o funcionamento de laboratórios de ensaios

CNE - Lab. do Centro Nacional de Embalagem (Papel, cartão, embalagens, plásticos, tintas, vernizes e brinquedos).

Autosil - Lab. de Ens. Eléctricos de Baterias, SARL (Baterias).

Catim - Lab. Material Queima, Centro Apoio Ind. Metalomecânica (ap. gás).

APGC - Lab. Serv. Ensaio, Assoc. Portuguesa de Gases Combustíveis (Aparelhos a gás).

Cencal - Lab. Centro Formação Profissional, Ind. Cerâmica (Louça cerâmica).

Tudor - Lab. Eléctrico de Ensaio de Baterias, SA. (Baterias).

Mabor - Lab. de Ensaio da Continental Mabor Ind. Pneus, SA (Pneus).

Portucel - Lab. do Centro Fabril de Setúbal (Pasta, papel).

Portucel - Lab. do Centro Fabril de Cacia (Pasta, papel).

Portucel - Lab. do Centro de Investigação Tecnológica (pasta, papel).

Cires - Lab. de Ensaio (Resina, PVC, águas efluentes).

Portucel - Lab. Central de Embalagem (Papel, cartão).

Portucel - Lab. do Centro Fabril de Rodão (Pasta, papel).

CTCV - Lab. de Análises Qui., Estruturais e Ensaio Mecânicos (Louça cerâmica, vidro).

Petrogal/FAR - Lab. da Fáb. de Aromáticos da Petrogal (Produtos aromáticos derivados do petróleo).

Portucel - Lab. do Centro Fabril de Viana (Papel).

LPQ - Lab. Pró-Qualidade, SA (Águas, adubos).

LNETI, Lab. de Análises Qui. de Materiais no Dep. Central de Estudos e Análises Industriais (Análises químicas).

LPQ - Lab. Pró-Qualidade, SA (Agro-alimentar).

APEB - Lab. da Assoc. Portuguesa das Empresas de Betão Pronto - Betões, cimentos

INAPA - Lab. de Ensaio de Papel, SA (Papel).

GDP - Lab. da Empresa Gás de Portugal, SA (Análises ao dióxido de carbono alimentar).

LABORATÓRIOS METROLÓGICOS ACREDITADOS EM 93.10.13

NORMA DE REFERÊNCIA: NP EN 45 001 – Critérios gerais para o funcionamento de laboratórios de ensaios

Catim - Lab. Metrologia das Temperaturas do Centro de Apoio Tecnológico Ind. Metalomecânica (Temperatura).

AIPA - Lab. de Contagem de Fibras de Amianto (Contagem de fibras de amianto).

PAL - Lab. de Ensaio Físico Químicos da P-Produtos Alimentares, SA (Produtos cárneos e alimentos p/ animais).

GDP - Lab. da Gás Portugal, SA (Anidrido ftálico e plastificantes).

SGS - Lab. de Ensaio Agro-Alimentar, Lda (Alimentar).

Alco - Lab. Central da Alco, SA (Óleos vegetais).

CITEVE - Lab. do Centro Tecnológico das Ind. Têxtil e Vestuário de Portugal (Têxtil).

Quimigal - Lab. da Unidade Fabril de Adubos de Alverca, SA (Adubos).

LNETI - Lab. de Tintas e Revestimentos do Dep. de Tecnologia de Materiais (Tintas e revestimentos).

INDEP - Lab. de Pólvoras e Explosivos da INDEP, SA (Pólvoras e explosivos).

INDEP - Lab. de Ensaio Mecânicos da INDEP, SA (Materiais metálicos).

INDEP - Lab. Química Industrial e Metal. da INDEP, SA (Ligas metálicas e cartão).

Petrogal/GALP - Lab. GALP da Dir. Geral de Marketing da Petrogal, SA (Lubrificantes, combustíveis e fuel).

EPAC - Direcção Lab. e Tecnológica de Cereais da EPAC (Cereais).

Petrogal - Lab. da Refinaria do Porto, SA (Produtos petrolíferos).

The General Tire and Rubber Company of Morocco - Lab. de Ensaio de Pneus (Pneus).

CTCOR - Centro Tecnológico da Cortiça (Produtos de cortiça).

BP Portuguesa - Lab. da BP Portuguesa, SA (Óleos lubrificantes).

INETI - Lab. de Análise Quím. de Águas e Efluentes do DCEAI (Águas e efluentes).

Lab. da AGA - Álcool e Géneros Alimentares, SA (Álcool e bebidas espirituosas).

Laboratório EGI - Sociedade de Engenharia e Gestão da Qualidade Industrial, Lda. (Agro-alimentar).

Lab. Soquilab da Soquímica - Soc. de Repres. de Química, Lda (Instrumentos de pesagem).

para que um produto ou serviço seja aceite em toda a Comunidade.

Posteriormente, foram elaborados dois documentos onde os laboratórios credenciados são referidos - a Directiva 89/397/CEE, de 14 de Junho de 1989, relativa ao controlo oficial dos géneros alimentícios, e a Directiva do Conselho COM (91) 526 - SYN 377, de 6 de Fevereiro de 1992, relativa às medidas adicionais respeitantes ao controlo oficial dos géneros alimentícios.

Valerá a pena, para melhor enquadramento da questão, transcrever, no que toca à primeira das Directivas referidas, o seu artigo 7.º, § 2.º: "As análises serão efectuadas por laboratórios oficiais dos géneros alimentícios". Quanto à segunda, refere o seu artigo 4.º: "Para evitar obstáculos ao comércio e a duplicação desnecessária de análises laboratoriais, o reconhecimento mútuo dos resultados laboratoriais efectuados pelos serviços de inspecção deverá ser considerado como condição essencial para o comércio de géneros alimentícios sem restrições entre os Estados-membros".

Significa isto que, nos laboratórios aos quais as autoridades competentes de cada Estado-membro confiaram o controlo dos géneros alimentícios, deverá introduzir-se um sistema de normas de qualidade que garanta a qualidade dos dados de ensaio.

A norma europeia EN 45001 fornece um modelo satisfatório para o trabalho repetitivo desses laboratórios, devendo, no entanto, ser complementado por determinadas disposições dos princípios da boa prática de laboratório da OCDE, de modo a obter-se uma verificação aleatória da conformidade do trabalho laboratorial não repetitivo com os processos de funcionamento.

A designação de laboratórios aptos à comprovação exigida pelas directivas "Nova Abordagem" é feita, actualmente, com base na acreditação desses laboratórios. Em domínios onde não é exigível a intervenção de entidades independentes, mas se exigem apenas declarações de conformidade dos fabricantes, estes têm vindo, cada vez mais, a encontrar interesse em terem os seus próprios laboratórios acreditados, a fim de obterem, eles próprios também, maior confiança nos resultados de ensaios que realizam, tornando-os mais credíveis perante terceiros.

* Director Laboratorial da EPAC

Qualidade da Embalagem

MARIA ANTONIETA RAMOS*

O Centro Nacional de Embalagem é a entidade que, em Portugal, para além de outras, centraliza as actividades conducentes à melhoria da Qualidade da Embalagem. Independente dos vários agentes económicos envolvidos, dado que é uma associação de direito privado sem fins lucrativos, integra fabricantes e utilizadores de embalagens, transportadores e alguns organismos públicos.

Como Laboratório Acreditado pelo Instituto Português da Qualidade, executa ensaios químicos, físicos e mecânicos sobre embalagens e seus materiais, ensaios sobre paletes, nomeadamente "EUR", e ensaios sobre segurança de brinquedos.

Por delegação do IPQ, como Organismo de Certificação Sectorial, nos domínios das embalagens em geral e seus materiais, especificamente das destinadas a acondicionarem e/ou transportarem matérias explosivas, inflamáveis, tóxicas e corrosivas, cuja certificação é

obrigatória por lei, analisa os processos e emite os certificados relativos aos modelos de embalagem ensaiados no seu próprio laboratório, para tal acreditado.

Relativamente aos sistemas de certificação existentes, na área de actividade do CNE, com excepção para matérias perigosas, eles são de carácter voluntário e, muitas vezes, é a imposição do mercado, sobretudo o externo e cada vez mais o interno, que obriga os fabricantes a cumprirem normas de fabrico e a certificarem as embalagens.

No caso da segurança dos brinquedos, sendo a responsabilidade da aposição da Marca CE do fabricante ou importador, somente através de uma acção sistemática da IGAE - Inspecção Geral de Actividades Económicas - se poderá moralizar o mercado.

Sobre a receptividade e resposta das indústrias e empresas portuguesas, não se notou, pelo menos em termos de

recurso aos serviços do CNE, grande preocupação, nem com a entrada na CE, nem com a formação recente do Espaço Económico Europeu.

O sector ainda não se apercebeu de que a livre concorrência é muito mais do que um acordo assinado entre Estados e que só pela via da Qualidade a sobrevivência será possível. Tendo ao seu alcance, no CNE, todos os meios necessários para apoiar e ajudar a enfrentar esses grande desafio, os industriais não os aproveitam, preferindo viver a política do "remediar" em vez da do "prevenir".

Se esta mentalidade se mantiver, muitas empresas serão obrigadas, a médio prazo, a encerrar as suas actividades, com as implicações sociais e económicas daí decorrentes.

** Directora do Laboratório do Centro Nacional de Embalagem*

A Acreditação de um Laboratório Vale a Pena

CRISTINA RAMOS*



O Laboratório de Ensaios da Cires está vocacionado para o controlo da Qualidade do PVC produzido na nossa empresa, tendo outras áreas de trabalho, tais como o controlo de águas e efluentes, matérias primas e subsidiárias, bem como o apoio à assistência técnica da empresa. Iniciou, por empenhamento da Direcção, o seu processo com vista à

Acreditação em Outubro de 1988. Presentemente, procede a vários trabalhos para o exterior, no domínio do controlo analítico de águas de abastecimento, de processo e efluentes líquidos, nomeadamente para Câmaras Municipais e serviços municipalizados e para diversas indústrias dos mais variados ramos de actividade.

Com base na Directiva CNQ 8/85, este laboratório formalizou o seu Sistema de Qualidade e realizou todas as acções necessárias para cumprir a referida Directiva, nomeadamente: formalização por escrito de todos os procedimentos operatórios; sistematização de arquivos, instruções de manutenção e calibração; validação de todos os métodos a acreditar (calibrações de equipamento e material, ensaios de aptidão, etc.); formação do pessoal nos aspectos da qualidade e controlo estatístico, continuando a formação em exercício, já em vigor, há alguns anos, no Laboratório e, claro está, a elaboração do seu Manual de Qualidade.

Esta acreditação do Laboratório, concretizada em Agosto de 1989, visava, na época, dar maior credibilidade externa aos resultados analíticos fornecidos nos certificados de análise do produto fabricado e estava inserida numa acção mais vasta, hoje já concretizada, de certificação da Empresa segundo a norma EN/NP 29002.

A crescente procura de Laborató-

rios Acreditados para a realização de análise de águas, e uma vez que a estrutura do Sistema de Qualidade estava montada e em pleno funcionamento, e tínhamos cerca de 25 anos de experiência no controlo de águas potáveis e de processo, bem como cerca de 10 no que toca ao controlo de efluentes líquidos, avançámos em Agosto de 1990 para a Acreditação de métodos de análise de águas, agora com exigências acrescidas pela entrada em vigor da norma EN/NP 45001 para Acreditação de Laboratórios, e que equivale às EN/NP 29000 para a Certificação das Empresas.

É de salientar que todo o processo de acreditação, ainda que com um peso de carácter "burocrático" demasiado grande, foi "classificado" por todos os intervenientes e pelos clientes internos e externos como um factor de grande melhoria e de motivação para todos os que nele se empenharam e nele permanecem interessados e activos, pois "a Acreditação vale a pena se a vontade de melhorar não for pequena".

** Responsável pelo Laboratório de Ensaios da Cire*

Qualidade e Certificação

CELESTINA FERNANDES*

O Laboratório da GDP - Gás de Portugal, S.A. está acreditado, ou seja, garante a credibilidade técnica e deontológica dos ensaios realizados para controlo analítico, neste caso, do dióxido de carbono líquido (com aplicação, por exemplo, na alimentação e no tratamento de águas, como é o caso da que é bebida em Lisboa), do anidrido ftálico (usado no fabrico de ftalatos, resinas alquílicas, poliésteres insaturados e ainda como agente de síntese em química orgânica) e de ftalatos (utilizados basicamente nas indústrias de PVC flexível e no fabrico de tintas celulósicas e vinílicas, vernizes e lacas).

Estando o Laboratório acreditado perante o IPQ, teve de aceitar também a intervenção do Instituto da Qualidade Alimentar no mecanismo de acreditação relativo ao dióxido de carbono, por este produto ter um vasto campo de aplicação na alimentação humana.

O facto de o nosso laboratório

estar acreditado tem aumentado a confiança dos nossos clientes, facilitando muito certas relações, nomeadamente nas exportações. Abrem-se por outro lado novas perspectivas comerciais, pois muitas empresas industriais têm-nos considerado, através de um processo próprio, como "fornecedores qualificados", permitindo dispensar os ensaios de recepção aos produtos por nós fornecidos nos seus próprios laboratórios, o que se traduz numa apreciável economia de custos e tempo, pois o produto entregue segue imediatamente para as linhas de produção.

A GDP - Gás de Portugal, S.A. está igualmente a procurar obter a designação de "Empresa Certificada" para o seu serviço de utilidade pública de distribuição de gás, que se pretende que seja prestado inserido num sistema de qualidade para toda a Empresa.

** Laboratórios da GDP - Gás de Portugal S.A.*

MAGNETROM

Desde 1967

26 Anos ao Serviço da Investigação e Indústria

Aparelhagem de Instrumentação e Controlo
 Equipamento de Aquisição e Controlo
 Representantes exclusivos da
 EG & G / PAR

MAGNETROM – COMÉRCIO E INDÚSTRIA DE APARELHAGEM ELÉCTRICA, S.A.

Rua Fialho de Almeida, 5-2º Dt.º – 1000 LISBOA
 Tel. 387 19 18 Fax. 387 47 73

Instituto Português da **Q**ualidade

PORTUGUESE INSTITUTE FOR QUALITY
Rua José Estêvão, 83 A
1199 LISBOA CODEX Portugal
Tel (01) 52 39 78, 52 37 35, 52 37 59
Fax (01) 53 00 33
Tlx 13042 QUALIT P

**CERTIFICADO
DE QUALIFICAÇÃO**

NÚMERO

93/L. 100

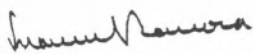
**O LABORATÓRIO SOQUILAB DA SOQUÍMICA - SOCIEDADE DE
REPRESENTAÇÕES DE QUÍMICA, LDA.**

com sede em Rua Coronel Santos Pedroso, 15 - 1500 LISBOA

é ACREDITADO de acordo com a norma NP EN 45 001, as Directivas CNQ 8 e 17 e ao abrigo do artigo 17º do Decreto-Lei nº 234/93 de 2 de Julho, para efectuar os trabalhos relativos a calibração discriminados em Anexo, que constitui parte integrante do presente Certificado.

Esta acreditação é válida por três anos, renovável por idênticos períodos.

Lisboa, 27 de Setembro de 1993



Francisco Barroca
Vice-Presidente



SOQUÍMICA

Sociedade de Representações de Química, Lda.

Rua Coronel Santos Pedroso • 1500 LISBOA
Tels.: 716 51 60 • Fax: 716 51 69 • Telex 62 419
Rua 5 de Outubro, 269 — Apartado 1327 — 4106 PORTO CODEX
Tels.: 609 30 69 / 606 86 82 / 600 30 48 • Fax: 600 08 34 • Telex: 26 049

A passagem da corrente eléctrica num condutor electrolítico: esclarecimento de um conceito erroneamente interpretado em alguns círculos do ensino secundário

VICTOR M. M. LOBO*

A passagem da corrente através de um condutor electrolítico é um assunto que tem suscitado algumas dúvidas a profissionais do Ensino Secundário, dúvidas essas agravadas por uma exposição num dado livro [1] muito utilizado nos últimos anos do Ensino Secundário, e que nos parece errónea. É nosso objectivo esclarecer esse aspecto que se fundamenta nos conceitos básicos da corrente eléctrica e da electroquímica.

A questão levantou-se-nos quando alguém nos mostrava um problema a apresentar a alunos no Ensino Secundário, o qual se poderá resumir [2] ao seguinte:

«Num condutor electrolítico (ou numa lâmpada fluorescente) passam 5 coulombs de iões positivos para um lado e 5 coulombo de iões negativos para outro em 20 segundos. Qual a intensidade da corrente?»

Como resposta dizia-se:

$$I = \frac{Q}{t} = \frac{5 + 5}{20} = 0,5 \text{ amperes}$$

É evidente que não estamos de acordo. A intensidade seria de $5/20 = 0,25$ amperes.

A discussão alastrou-se a diversos professores de várias escolas, uns perplexos, outros não aceitando, todos eles baseando-se no exposto na p. 134 da Ref. 1. Aí se trata do fenómeno da electrólise, se define Faraday, etc., e obviamente ligado ao conceito da passagem de corrente eléctrica num condutor electrolítico (pelo menos assim entendido pelos professores com quem temos contactado), aparece um problema do seguinte teor:

«A figura 77 representa um condutor não metálico dentro do qual existe um campo eléctrico de intensidade E. Estão representadas algumas das cargas livres, positivas e negativas, que atravessam a secção do condutor indicada a tra-

cejado durante 4,0 s. Nesse intervalo de tempo a referida secção é atravessada por uma carga positiva de 3,0 C, da esquerda para a direita, e por uma carga negativa de 3,0 C, da direita para a esquerda. Determine o valor médio da corrente no condutor durante aquele intervalo de tempo [R: $I=1,5$ A]».

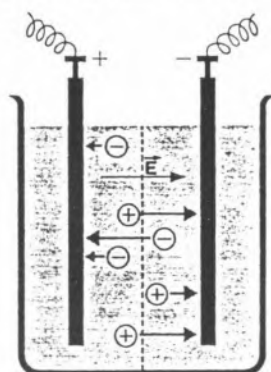


Fig. 77

A questão pode pois resumir-se nos seguintes termos:

Num condutor electrolítico há movimentação de cargas positivas num sentido e negativas no outro. A intensidade da corrente será a soma das cargas positivas com as cargas negativas que passam por unidade de tempo ou, será sim, a carga que passa num só sentido por unidade de tempo? Por outras palavras, a carga Q é igual a $Q_+ + Q_-$, ou só igual a Q_+ , ou Q_- (pois $Q_+ = Q_-$)?

Das noções básicas em que assentam os princípios da corrente eléctrica, parece-nos evidente que é a segunda alternativa a verdadeira. Basta pensarmos bem no que é a **corrente eléctrica**, e o que quer dizer **intensidade**.

O «princípio da electroneutralidade» exige sempre que a uma movimentação de cargas num certo sentido corresponda uma movimentação no sentido oposto (ou algo de equivalente)(*). Assim, imaginemos que no circuito da figura 1 há um fluxo de electrões de B

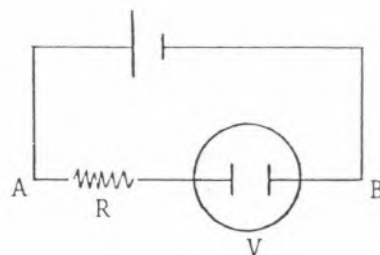
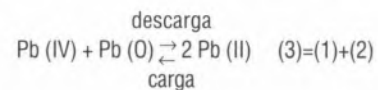
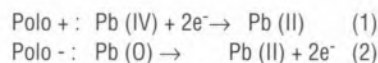


Figura 1 - Circuito eléctrico comum condutor electrolítico

para A (o sentido convencional da corrente é de A para B) correspondente à passagem de 5 coulombs em 20 segundos. Qual será a corrente na resistência R? Não temos dúvidas em dizer que é de $5/20 = 0,25$ amperes. E no voltmetro V? Será $(5 + 5)/20 = 0,5$ amperes? Então a corrente que passa em R não é a mesma que passa em V? Dir-se-ia: mas em V há cargas positivas e negativas em movimento e em R há só cargas negativas. Certo. Mas, para que em R haja movimentação de cargas negativas no gerador G há movimentação de cargas positivas e negativas.

Se o gerador for uma bateria de chumbo processar-se-ão as reacções [3,4] equivalentes a



Pensemos bem que são precisamente os electrões que se «acumulam» no polo negativo da bateria que fluem para o positivo através do circuito externo. Tal [5] é um imperativo dos princípios básicos evidente dos fenómenos acima tratados.

Pensemos bem também na diferença entre a passagem da corrente num condutor metálico e num electrolítico. No primeiro, pode dizer-se haver um fluxo de electrões, enquanto no segundo não há movimentação de electrões: há iões positivos e negativos a moverem-se. No primeiro, os electrões que fluem de B para A são logo «substituídos» por outros electrões que vêm do gerador (pense-se na analogia do tubo de água ligado a uma bomba de água em circuito fechado). No segundo, os electrões são «descarregados» para certos iões (dando, p. ex., um gás que se liberta), mas é evidente que têm de existir outros iões que vão ao «terminal» positivo descarregar uma quantidade igual de electrões. Mas de maneira nenhuma a corrente é a soma dos primeiros com os segundos. Aliás, todos os conceitos de número de transporte, conducência iónica equivalente, etc, estariam errados se a corrente fosse $(Q_+ + Q_-)/t$.

Para clarificarmos o nosso ponto de vista, imaginemos que em V da figura 1 se processava a electrodeposição de prata ($Ag \equiv 108$ gramas/mole). Sabemos que o Faraday, cerca de 96 500 coulombs, é a carga necessária para depositar uma «mole de electrões» (aqui o antigo termo electrão-grama talvez torne esse ponto mais evidente). Então a passagem de 96 500 coulombs deposita 108 gramas de prata. Se tal se processar em, por exemplo, 26h 48 m, logo diríamos que

$$I = \frac{Q}{t} = \frac{96\,500}{96\,480} \equiv 1\text{ A}$$

Mas se houve movimentação de Ag^+ para o eléctrodo negativo para captação de electrões, também houve movimentação de iões para o positivo precisamente para libertarem a mesma quantidade de electrões. Então a corrente foi de 2 amperes ou de 1 ampere?

É evidente que foi só de 1 A. Efectivamente, se nos dissessem que aquela corrente era de 2 A e tinha fluído em 26h e 48 m, nós logo diríamos que tinham sido depositados 2×108 gramas de prata. Uma pesagem do cátodo de prata logo revelaria estarmos errados: tinham sido depositados 108 gramas de prata, e não 216 g, pela passagem de 96 500 coulombs num sentido (e obviamente outros 96 500 coulombs no outro sentido).

Para comprovar o nosso ponto de vista expomos em seguida alguns extractos de livros.

Assim, no «Exemplo 1» da ref. 6,

A current of 0.1000 amp is passed through a cupric sulfate solution for 10 min, using platinum electrodes.

a) Calculate the number of grams of copper deposited at the cathode.

$$\frac{(10\text{min})(60\text{ sec min}^{-1})(0.1000\text{ amp})(63.54\text{ g mole}^{-1})}{(96.500\text{ amp sec equiv}^{-1})(2\text{ equiv mole}^{-1})} = 0.01975\text{ gram}$$

b) Calculate the volume of oxygen liberated at the anode at 25°C and 740 mm Hg.

$$\frac{(10\text{min})(60\text{ sec min}^{-1})(0.1000\text{ amp})(32\text{ g mole}^{-1})}{(96.500\text{ amp sec equiv}^{-1})(4\text{ equiv mole}^{-1})} = 4.98 \times 10^{-3}\text{ gram}$$

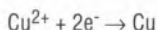
$$\frac{(4.98 \times 10^{-3})(0.08205\text{ 1 atm deg}^{-1}\text{ mole}^{-1})(298\text{ deg})}{(32\text{ g mole}^{-1})(740/760\text{ atm})} = 0.00392\text{ liter}$$

dá-se $I = 0,1$ A a electrolisar uma solução de $CuSO_4$ durante 10 min (= 600 s) e pede-se a quantidade de cobre depositado. O raciocínio exposto é

$$I = \frac{Q}{t} = \frac{Q}{600} = 0,1A, \text{ portanto}$$

$$Q = 600 \times 0,1 = 60\text{ coulombs.}$$

A reacção será:



Logo, 96 500 coulombs depositam 1/2 mole (ou digamos, 1/ 2 ião-grama, para melhor evidência) de Cu^{++} , ou seja 63,54/2 gramas.

Então

$$\begin{array}{l} 96\,500 \dots\dots\dots 63,54/2 \\ 60 \dots\dots\dots x \end{array}$$

$$x = 0,0197\text{ gramas}$$

É evidente que na electrólise se moveram Cu^{2+} num sentido, e uma quantidade equivalente de iões negativos (OH^-) no outro. Mas a corrente foi só de 0,1 A, e não 0,1 A + 0,1 A, porque se assim fosse, estaria errado o problema da ref. [5].

O mesmo se diria relativamente à alínea b).

O seguinte problema de um outro livro [7] revela o mesmo raciocínio:

Uma solução aquosa 0,200 molal em $CuSO_4$ fim do processo a solução catódica (de massa 36,4340 g) da célula electrolítica contém 0,4417 g de cobre. No cátodo de um voltâmetro de prata em série com a célula depositam-se 0,0405 g deste metal. Calcular os números de transporte do Cu^{++} e do SO_4^{2-} .

Resolução:

a) Calcule-se, em primeiro lugar, a quantidade de electricidade total Q_t que passa através da célula, a partir do conhecimento da massa de prata, a partir do conhecimento da massa de prata depositada no voltâmetro.

Pela expressão das Leis de Faraday e tomando para equivalente-grama da prata 108 g, tem-se

$$Q_t = I t = \frac{0,0405}{108} = 0,000375\text{ faradays}$$

b) Determine-se a quantidade de electricidade transportada pelo ião Cu^{++} a partir do número de equivalentes-grama de Cu^{++} que migram para o compartimento catódico da célula.

Para isso determine-se a massa de água em 36,4340 g de solução catódica no fim da electrólise:

$$\text{massa do cobre} = 0,4417\text{ g}$$

$$\text{massa de } CuSO_4 \text{ equivalente} =$$

$$= 0,4417 \frac{\text{mole de } CuSO_4}{\text{átomo g de } Cu} = 1,090\text{ g}$$

$$\text{massa de } H_2O = 36,4340 - 1,1090 = 35,3250\text{ g}$$

Calcule-se, agora, a variação da concentração de Cu^{++} na solução catódica:

$$n.^{\circ} \text{ de equivalentes g de } Cu^{++} (63,5/2\text{ g}) \text{ no fim do processo em } 35,3250\text{ g de água} = 0,01391$$

$$n.^{\circ} \text{ de equivalente g de } Cu^{++} \text{ inicialmente na mesma massa de água} =$$

$$= \frac{2,0200}{1000} 35,3250 = 0,01413$$

$$\text{variação do número de equivalentes g de } Cu^{++} = 0,01413 - 0,01391 = 0,00022$$

Ora, como são iguais os números de equivalentes-grama de cobre e prata que se depositam, respectivamente, no cátodo da célula e no do voltâmetro (0,000375), conclui-se que $0,000375 - 0,00022 = 0,000155$ equivalentes-grama de Cu^{++} migraram para o compartimento catódico. Isto significa que a quantidade de corrente transportada pelo Cu^{++} é exactamente 0,000155 faradays.

c) Deste modo, o número de transporte do Cu^{++} é

$$t_{\text{Cu}^{++}} = \frac{0,000155}{0,000375} = 0,413$$

e do SO_4

$$t_{\text{SO}_4} = 1 - t_{\text{Cu}^{++}} = 0,587$$

REFERÊNCIAS E NOTAS

1. A. Aido, M.A.P. Ponte, M.A. Martins, M.G.A. Bastos, M.J. Pereira, M.M. Leitão e R. Carvalho *FISICA - para o 2.º ano do Curso Complementar do Ensino Secundário*, Livraria Sá da Costa Editora, Lisboa (1977).

2. Texto integral do problema. «Numa lâmpada fluorescente, em 20 s, os iões positivos transportam 5 C de carga através de uma secção transversal da lâmpada da esquerda para a direita. Neste mesmo intervalo, os iões negativos que atravessam esta secção da esquerda para a direita. Neste mesmo intervalo, os iões negativos que atravessam esta secção transportam também 5 C. Qual é a intensidade desta corrente?».

3. V.M.M. Lobo (Corrosão em baterias de chumbo. Parte I - A situação actual do problema), *Revista de Corrosão e Protecção de Materiais*, 2 (1983) 42.

4. V.M.M. Lobo (Corrosão em baterias de chumbo. Parte II - A investigação em curso), *Revista de Corrosão e Protecção de Materiais*, 2 (1983) 2.

5. Efectivamente, na equação de continuidade

$$\text{div } \vec{i} + \frac{dp}{dt} = 0$$

$\frac{dp}{dt}$ é nulo num nodo, pois de contrário haveria acumulação de cargas no nodo. Então $\text{div } \vec{i} = 0$ e, pelo teorema de Ostrogradsky,

$$\iiint_V \text{div } \vec{i} \, d\tau = \iint_S \vec{i} \cdot \vec{n} \, dS = \Sigma I_i = 0$$

6. F. Daniels e R.A. Alberty, *Physical Chemistry*, John Wiley, New York (1962).

7. F. Pinto Coelho e V. M. S. Gil *Problemas de Química Geral*, Coimbra Editora (1962).

(*) Em experiências de cariz electrostático podemos carregar corpos com «electricidade positiva ou negativa», recorrendo a processos de fricção que removem electrões de um lado para o outro. Nesse caso não há «electroneutralidade nos corpos», mas sabemos bem que uma pequeníssima percentagem de «desiquilíbrio eléctrico» dá logo origem a voltagens elevadíssimas, como as que observamos aquando de trovoadas. Este assunto é muito bem tratado no livro «História da Electricidade Estática» de Rómulo de Carvalho, autor por quem temos a mais elevada consideração e estima (enquanto professor no liceu que frequentámos, muitas vezes nos tirou dúvidas).

* Departamento de Química,
Universidade de Coimbra

Biodinâmica

Biónica Aplicada Lda.

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

INSTRUMENTAÇÃO

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

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

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

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

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

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

centrifugação e electrocinética.

KINETIC SYSTEMS - Mesas e "breadboards" para óptica.

GENTEC - Medidores de energia para lasers.

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

CORION - Gama completa de filtros ópticos.

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

HELLMA - Células (cuvettes) em vidro e quartzo.

Desenvolvimento e construção de instrumentação.

Exponha-nos as suas necessidades

Espectroscopia de Absorção no Ultravioleta e Visível

J. M. G. MARTINHO*

1. INTRODUÇÃO

A absorção de radiação electromagnética da região do ultravioleta (UV) (100-400 nm) e visível (Vis) (400-800 nm) por parte de moléculas, átomos ou iões está normalmente associada a transições electrónicas. Estas ocorrem quando, por interacção da radiação electromagnética com o meio absorvente, um electrão é promovido dum estado electrónico de baixa energia para outro de energia mais elevada.

A quantidade de luz absorvida quando um feixe de radiação monocromática atravessa o meio absorvente depende da concentração, do coeficiente de absorção molar da espécie absorvente e do percurso óptico da radiação [1]. O estudo da sua variação com a concentração permite: i) a determinação quantitativa de um grande número de substâncias químicas e biológicas (a título de exemplo, refira-se que mais de 95% das análises clínicas nos Estados Unidos são feitas por métodos espectrofotométricos); ii) o estudo cinético de reacções lentas em solução; iii) a determinação de curvas de titulação. Por outro lado, a compilação de espectros de absorção (representação gráfica do coeficiente de absorção molar em função do comprimento de onda) sob a forma de atlas ou bases de dados é usada para: i) identificação e verificação do grau de pureza de compostos; ii) cálculo da diferença de energia entre estados electrónicos e do momento dipolar da transição.

O desenvolvimento da espectroscopia de absorção UV-Vis tem sido constante ao longo dos últimos anos, sendo a técnica revista em número especial do *Analytical Chemistry*, de dois em dois anos, desde 1945 [2].

Este trabalho descreve os princípios da espectroscopia de absorção UV-Vis, pretendendo constituir um conjunto de conhecimentos básicos necessários a um estudo mais aprofundado da mesma.

2. LEI DE BEER

A intensidade de um feixe de radiação electromagnética é atenuada ao

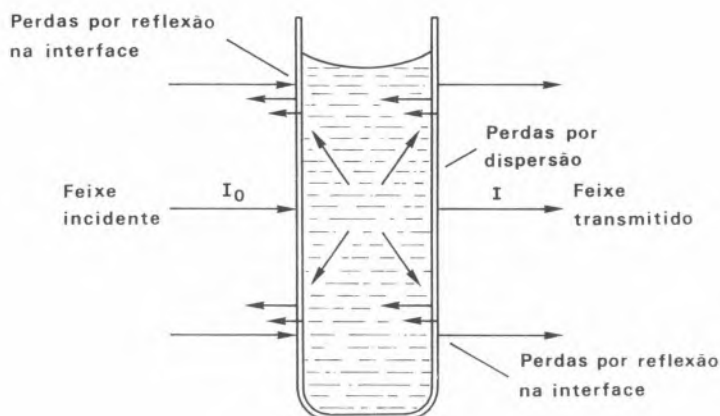


Fig. 1. Esquema dos processos que ocorrem quando um feixe de radiação electromagnética incide numa célula que contém uma solução absorvente.

atravessar um meio que contém uma espécie absorvente (fig. 1), devido a sucessivos processos de absorção, reflexões nas paredes da célula e a fenómenos de dispersão [3a].

Considerando apenas os processos de absorção, a intensidade¹ do feixe transmitido, I , relaciona-se com a do feixe incidente, I_0 (paralelo e monocromático de comprimento de onda λ), pela lei de Beer [3]

$$I = I_0 10^{-\epsilon(\lambda)cb} \quad (1)$$

onde c (mol l^{-1}) é a concentração da espécie absorvente, ϵ ($\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$) o coeficiente de absorção molar ao comprimento de onda λ , e b (cm) o percurso óptico da radiação no meio². Experimentalmente, mede-se a razão de intensidades

$$T = \frac{I}{I_0} = 10^{-\epsilon(\lambda)cb} \quad (2)$$

que se designa por transmitância. Para um meio totalmente absorvente a transmitância é nula ($I=0$), enquanto que para um meio completamente transparente é unitária ($I=I_0$). Embora a transmitância seja uma grandeza cujo significado é intuitivo, é vulgarmente substituída pela absorvência

$$A = -\log_{10} T = \epsilon(\lambda)cb \quad (3)$$

que apresenta a vantagem de variar linearmente com a concentração, percurso óptico e coeficiente de absorção molar.

3. DESVIOS À LEI DE BEER

A lei de Beer é vulgarmente usada para a determinação de concentrações, coeficientes de absorção molar e mesmo percursos ópticos. A obtenção de valores exactos destas grandezas deve ter em conta os desvios à linearidade da absorvência com a concentração. Estes desvios ocorrem para concentrações superiores a 0.01 M e resultam da variação do coeficiente de absorção molar, provocada pelas interacções entre núvens electrónicas. A esta concentração, a distância média entre espécies absorventes é próxima de 70 Å, o que faria supor a inexistência de interacção entre núvens electrónicas. Contudo, devido à existência de uma distribuição de distâncias, os desvios à lei de Beer resultam de interacções entre pares de moléculas a menores distâncias. Em soluções de electrólitos este efeito é ainda mais pronunciado, podendo fazer-se sentir para concentrações muito inferiores. Uma outra causa de desvios à lei de Beer é a variação do coeficiente de absorção molar com o índice de refração do meio que, por sua vez, depende da concentração da espécie absorvente. Os desvios à lei de Beer provocados por esta dependência não são perceptíveis para concentrações inferiores a 0.01M, sendo geralmente ignorados. Outros

desvios provocados por limitações instrumentais serão abordados na parte referente à instrumentação.

4. ESPECTROS ELECTRÓNICOS

Os espectros de absorção no UV-Vis de gases monoatômicos a baixa pressão são espectros de riscas, enquanto os espectros moleculares são espectros de bandas. Tal resulta do facto de as moléculas possuírem, para além da energia electrónica, energia vibracional e rotacional, enquanto os átomos apenas possuem energia electrónica. O diagrama energético de uma molécula no estado gasoso é bastante mais complexo do que o de um átomo (fig. 2), pois cada estado electrónico molecular tem associados vários estados vibracionais e rotacionais.

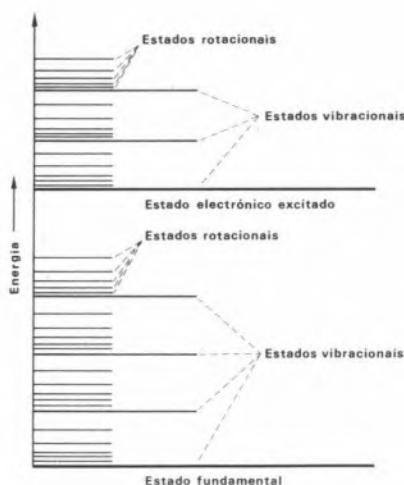


Figura 2. Diagrama esquemático dos diferentes níveis energéticos de uma molécula.

Uma transição electrónica ocorre quando a energia da radiação iguala a diferença de energia entre os estados envolvidos na transição, ΔE , pelo que

$$\Delta E = hc / \lambda \quad (4)$$

onde h é a constante de Planck, c a velocidade da luz no vácuo e λ o comprimento de onda da radiação incidente. As transições moleculares ocorrem, à temperatura ambiente, do primeiro nível vibracional do estado electrónico fundamental para vários níveis rotovibracionais dos diferentes estados excitados. Como a diferença de energia entre os níveis rotovibracionais dos estados exci-

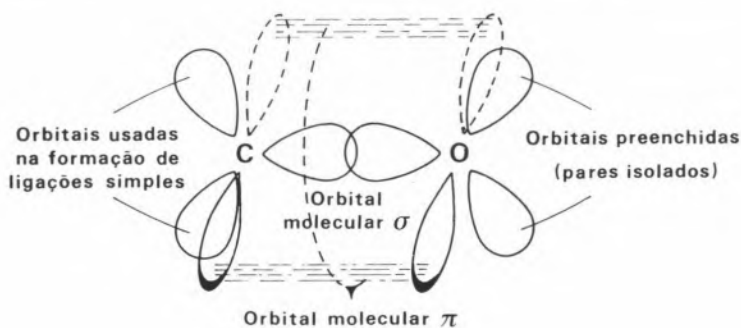
tados é muito inferior à diferença de energia entre os estados electrónicos (a diferença de energia entre níveis rotacionais é da ordem de $10 \text{ cm}^{-1} < > 0.13 \text{ kJmol}^{-1}$), a banda de absorção correspondente a uma transição electrónica é composta de um "quase contínuo" de transições. Em solução, as diferenças de energia entre estados rotovibracionais são ainda menores do que as observadas no estado gasoso, devido às interacções soluto-solvente.

A intensidade de absorção, medida pelo maior ou menor valor de ϵ , depende da secção recta de captura de um fóton pela espécie absorvente, isto é, da probabilidade da transição electrónica que é ditada pelo valor do momento dipolar de transição. Transições com valores de $\epsilon > 10^4 \text{ mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$ são francamente permitidas, enquanto valores de $\epsilon < 10^3 \text{ mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$ indicam transições proibidas [4].

4.1 Transições electrónicas do grupo carbonilo

Uma vez que a absorção de radiação UV-Vis por uma espécie absorvente conduz à promoção de um electrão de uma orbital para outra de maior energia, as transições electrónicas podem ser qualitativamente previstas a partir do diagrama de orbitais moleculares. O espectro de absorção de moléculas complexas pode, em geral, ser interpretado com base nos espectros dos seus grupos cromóforos, desde que estes estejam separados pelo menos por uma ligação simples. A título de exemplo, apresenta-se na fig. 3 o diagrama de orbitais moleculares de um cromóforo característico, o grupo carbonilo ($>C=O$) [4,5].

Figura 3. Diagrama esquemático da formação de orbitais moleculares para o grupo carbonilo.



O carbono forma uma ligação dupla (uma de tipo σ e outra de tipo π) com o oxigénio. A ligação σ é assegurada por dois electrões (um do átomo de carbono e outro do átomo de oxigénio) que vão ocupar uma orbital molecular ligante (de mais baixa energia do que as correspondentes orbitais atômicas), resultante da coalescência directa das orbitais atômicas híbridas sp_2 . A ligação π é assegurada por dois electrões numa orbital molecular ligante, resultante da coalescência lateral das orbitais atômicas $2p_z$ dos átomos de carbono e oxigénio. Os dois pares de electrões em orbitais sp_2 do átomo de oxigénio não participam na ligação, pelo que ocupam orbitais moleculares não ligantes, n , com energia semelhante à das correspondentes orbitais atômicas. O diagrama de níveis de energia, que inclui as orbitais antiligantes σ^* e π^* (de maior energia do que as correspondentes orbitais atômicas, pelo que não participam na ligação), mostra que a transição de menor energia corresponde à passagem dum electrão da orbital n para a orbital π^* (transição $n \rightarrow \pi^*$).

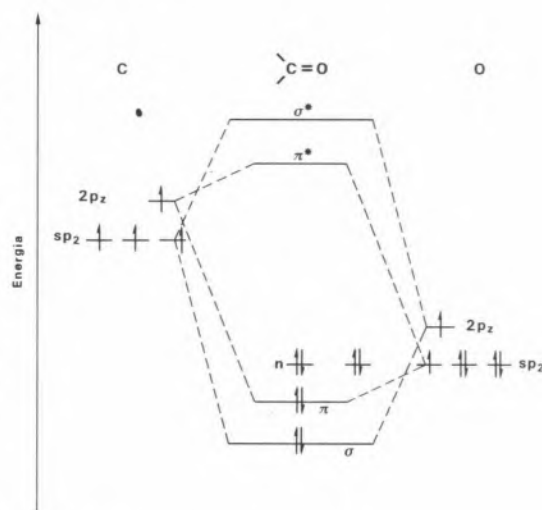


Figura 4. Diagrama de níveis de energia das orbitais moleculares do grupo carbonilo.

Tabela I

Características ópticas de alguns grupos cromóforos presentes em moléculas orgânicas e biológicas

Cromóforo	Exemplo	Solvente	λ_{max}/nm	$\epsilon_{max}/l\ mol^{-1}\ cm^{-1}$	Transição
Alceno	<chem>C6H5CH=CH2</chem>	n-Heptano	177	13 000	$\pi \rightarrow \pi^*$
Alcino	<chem>C2H2</chem>	n-Heptano	178	10 000	$\pi \rightarrow \pi^*$
			196	2 000	-
			225	160	-
Carbonilo	<chem>CH3COCH3</chem>	n-Hexano	186	1 000	$n \rightarrow \sigma^*$
			280	16	$n \rightarrow \pi^*$
			180	<1000	$n \rightarrow \sigma^*$
			293	12	$n \rightarrow \pi^*$
Carboxilo	<chem>CH3COOH</chem>	Etanol	204	41	$n \rightarrow \pi^*$
Amida	<chem>CH3CONH2</chem>	Água	214	60	$n \rightarrow \pi^*$
Azo	<chem>CH3N=NCH3</chem>	Etanol	339	5	$n \rightarrow \pi^*$
Nitro	<chem>CH3NO2</chem>	Isooctano	280	22	$n \rightarrow \pi^*$
Nitroso	<chem>C4H9NO</chem>	Eter etílico	300	100	-
			665	20	$n \rightarrow \pi^*$
Nitrato	<chem>C2H5ONO2</chem>	Dioxano	270	12	$n \rightarrow \pi^*$

Tabela I

Características ópticas de alguns grupos cromóforos presentes em moléculas orgânicas e biológicas

Esta transição ocorre no ultravioleta ($\lambda \approx 270nm$), sendo o valor exacto da sua energia dependente do solvente (efeito solvatocrômico). Solventes polares estabilizam mais as orbitais não ligantes n do que as orbitais antiligantes π^* , provocando o deslocamento das bandas para maiores energias (deslocamento para o azul). Este tipo de transição é também responsável pela absorção no UV de aniões inorgânicos (nitrato, nitrito, etc.), com relevância em Química Analítica Alimentar [6]. Outras transições, associadas à promoção de um electrão da orbital ligante para a orbital antiligante π^* (transição $\pi \rightarrow \pi^*$), ou à promoção de um electrão da orbital n para a orbital σ^* (transição $n \rightarrow \sigma^*$), ocorrem neste tipo de cromóforos a comprimentos de onda muito baixos (energias muito elevadas), pelo que não são experimentalmente acessíveis com os espectrofotómetros convencionais.

4.2. Compostos com transições $\pi \rightarrow \pi^*$ e $n \rightarrow \sigma^*$ no UV-Vis

As transições $\pi \rightarrow \pi^*$ podem

ocorrer no ultravioleta e visível, desde que exista deslocalização dos electrões π , como sucede, por exemplo, nos compostos aromáticos. Existem compostos orgânicos, nomeadamente corantes, com bandas de absorção $\pi \rightarrow \pi^*$ cobrindo toda a região do visível até ao infravermelho próximo. As transições $\pi \rightarrow \pi^*$ distinguem-se das transições $n \rightarrow \pi^*$ por responderem de modo diferente à polaridade do solvente. Em geral, solventes polares estabilizam mais a orbital π^* do que a orbital π , observando-se um desvio da banda $\pi \rightarrow \pi^*$ para menores energias (deslocamento para o vermelho) com o aumento da polaridade do solvente. Transições $n \rightarrow \sigma^*$ só ocorrem no ultravioleta para um número muito reduzido de compostos ($\lambda_{max} = 227nm$, $\epsilon \sim 900\ l\ mol^{-1}\ cm^{-1}$ para o $(CH_3)_3N$; $\lambda_{max} = 215nm$, $\epsilon \sim 600\ l\ mol^{-1}\ cm^{-1}$ para o CH_3N_2) [1]. Estas transições respondem à polaridade do solvente do mesmo modo que as transições $n \rightarrow \pi^*$, pelo que são difíceis de distinguir destas por estudos solvatocrômicos.

Na tabela 1 resumem-se algumas propriedades de grupos cromóforos característicos (grupo carbonilo, carbonilo, nitroso, etc.) que permitem interpretar o espectro de absorção de muitas substâncias.

4.3. Absorção de complexos metálicos

Na região UV-Vis, e mesmo no infravermelho próximo, absorvem também muitos complexos metálicos [7]. Os espectros de absorção dos complexos de lantanídeos e actinídeos são constituídos por bandas muito estreitas, características dos elementos centrais, sendo pouco afectadas pelo tipo de ligando e solvente. Tal resulta do facto de as transições electrónicas envolverem electrões em subcamadas internas, que se encontram protegidos pelos electrões das camadas electrónicas exteriores. Por seu lado, os complexos dos metais de transição apresentam espectros de bandas mais largas, que são fortemente afectadas pelo tipo de ligando, estrutura do complexo e solvente. O espectro de absorção UV-Vis de complexos metálicos com um grupo doador e outro aceitante de electrões pode também apresentar bandas de transferência de carga, resultantes da transferência de um electrão do grupo doador para o grupo aceitante. Um exemplo típico é a banda de absorção do complexo de Fe(III) com o ião tiocianato (SCN^-),

$[FeSCN(H_2O)_5]^{2+}$ (tiocianopentaquoferro (III)), que resulta da transferência de um electrão do ião tiocianato para o ião férrico, que é reduzido a ião ferroso. A espécie electronicamente excitada relaxa rapidamente para o estado fundamental, regenerando o complexo inicial.

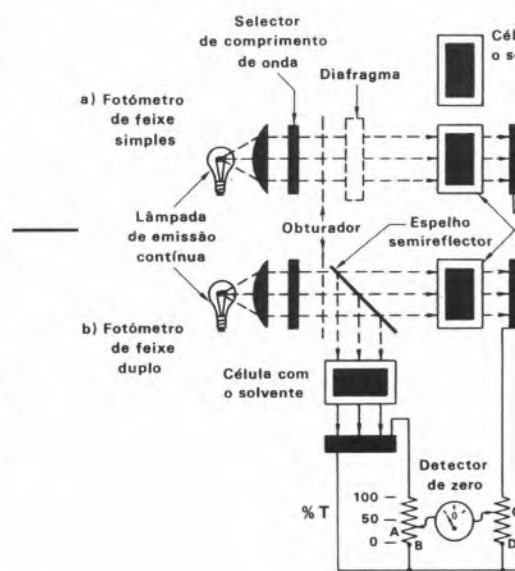
5. INSTRUMENTAÇÃO

5.1 Espectrofotómetros convencionais

Os equipamentos de medida de absorvência (ou transmitância) designam-se por espectrofotómetros ou por fotómetros, conforme tenham ou não possibilidade de fazer o varrimento de comprimentos de onda (obtenção do espectro de absorção). Um fotómetro (espectrofotómetro) de absorção é basicamente constituído por uma fonte de radiação contínua, um selector de comprimentos de onda (filtros ou monocromador), o porta-amostras, um detector de radiação (fotomultiplicador, bateria de fotodíodos) e um medidor de corrente. A fig. 5 mostra as configurações básicas para fotómetros de feixe simples e de feixe duplo.

Nos equipamentos de feixe duplo mede-se directamente a absorvência (transmitância), enquanto nos de feixe simples realizam-se medidas sequenciais da intensidade do feixe incidente (usando uma célula com o solvente) e do feixe transmitido (usando uma célula com a amostra). Os

Figura 5. Esquema de blocos de um fotómetro de feixe simples (a) e feixe duplo (b).





Ficha Bibliográfica (Teses de Doutoramento e Mestrado)

Autor (1) _____

Título _____

Subtítulo _____

Impressora (2) _____

Local de Impressão _____

Ano _____

Nº de páginas (3) _____

Dimensões (em milímetros, A4 ou A5) _____

Área científica (4) _____

Localização (5) _____

Tese de (6) _____

Faculdade e Universidade _____

(1) Nome tal como figura na obra. (2) Se aplicável. (3) Se houver n páginas iniciais numeradas em romano indicar sob a forma $n+m$, sendo m o número de páginas restantes. (4) Use palavras-chave para descrever o âmbito da obra. (5) Biblioteca (ou pessoa) que possui a obra em causa. (6) Doutoramento ou Mestrado. Para teses mais antigas transcrever as palavras originais (Dissertação para ...).

Depois de preenchida, enviar para:

Sociedade Portuguesa de Química
Secretário Geral
Av. da República, 37, 4º
1000 Lisboa



Ficha Bibliográfica (Livros e Sebentas)

Autores (1) _____

Título da Obra _____

Subtítulo _____
Nº da Edição (2) _____
Editora (3) _____
Sede da Editora (4) _____
Impressora (3) _____
Local de Impressão _____
Ano _____
Distribuidora (5) _____
Nº de páginas _____ Preço (6) _____
Dimensões (em milímetros, A4 ou A5) _____
Área científica (7) _____

Título da Série (8) _____
Volume nº (8) _____
Localização (9) _____
Notas (10) _____

(1) Nomes tal como figuram na obra. (2) Preencher uma ficha por cada edição da obra. (3) Nome completo. (4) Localidade. (5) Se conhecida e diferente da editora. (6) Se conhecido. (7) Use palavras-chave para descrever o âmbito da obra. (8) Se aplicável. (9) Biblioteca (ou pessoa) que possui a obra em causa. (10) Outras informações consideradas de interesse. Exemplos: tiragem da edição, tradutor (se aplicável), etc..

Depois de preenchida, enviar para:

Sociedade Portuguesa de Química
Secretário Geral
Av. da República, 37, 4º
1000 Lisboa

equipamentos de feixe duplo utilizam dois feixes de luz, um que passa numa célula com a amostra e outro numa célula com o solvente, sendo os dois sinais tratados electronicamente, de modo a obter directamente a absorvência (transmitância).

Os fotômetros são muito mais baratos do que os espectrofotômetros, mas não permitem a obtenção de espectros. Contudo, a relação sinal-ruído é, em geral, boa, devido ao uso de filtros de banda larga, sendo mesmo possível usar fontes de radiação de fraca intensidade (lâmpadas de filamento de tungsténio), bem como detectores e circuitos de medida baratos.

De entre os espectrofotômetros, merece realce o "velho" *Spectronic 20*, cujo lançamento remonta aos anos 50, e que ainda hoje, numa versão melhorada, tem grande popularidade no ensino e na indústria. Este espectrofotómetro de feixe simples usa uma lâmpada de filamento de tungsténio (340-2500nm) e um fotomultiplicador sensível na gama de 340-625nm, o qual pode ser substituído por um outro, sensível no vermelho até aos 900nm.

Os espectrofotômetros mais dispendiosos são de feixe duplo, utilizam duas fontes de radiação (lâmpadas de tungsténio e de deutério), monocromador duplo, e detectores e circuitos eléctricos sofisticados, com excelentes razões sinal/ruído. Estes espectrofotômetros têm resoluções da ordem de 0.1nm e permitem o traçado de espectros de absorção na gama de 180nm a 900nm (o uso de detectores de sulfito de chumbo permite estender a gama de comprimentos de onda ao infravermelho). A componente de luz parasita é geralmente inferior a 0.001% da intensidade do feixe incidente, em toda a gama de comprimentos de onda.

Em meados dos anos 70, foram introduzidos os espectrofotômetros com detectores baseados em baterias de fotodiodos.

Neste tipo de espectrofotômetros a radiação dispersa é analisada por uma nbateria de fotodiodos sensíveis a gamas estreitas de energia, estando-se, assim, o varrimento mecânico do espectro. Estes espectrofotômetros tornaram-se muito populares, por permitirem a aquisição

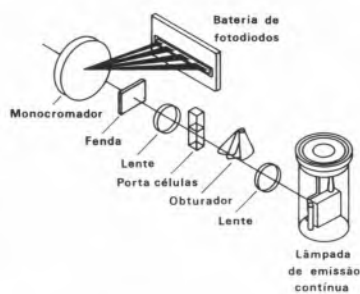


Figura 6. Esquema de blocos de um espectrofotómetro de bateria de fotodiodos.

de um espectro (200nm a 800nm) em menos de 0.1s. A sua principal limitação reside na resolução espectral que, tipicamente, é da ordem de 2nm.

5.2. Espectrofotômetros fotoacústicos

A determinação de espectros de amostras sólidas e soluções turvas³ por métodos convencionais é difícil, devido à interferência da luz dispersa e reflectida. Na espectroscopia fotoacústica são detectados sinais fotoacústicos gerados pela espécie absorvente, quando dissipa a energia de excitação sob a forma de calor. A dissipação de calor provém dos processos de desactivação não radiativos, que envolvem a conversão da energia electrónica da espécie inicialmente excitada em energia translacional e rotovibracional das moléculas vizinhas. A expansão do meio, devida ao aumento da temperatura, gera um sinal fotoacústico, desde que o feixe de excitação seja modulado em frequência da região das ondas acústicas.

Na figura 7 representa-se o diagrama de blocos de um espectrofotómetro fotoacústico, composto por um feixe de luz modulada, uma célula fotoacústica onde são geradas as ondas sonoras e o detector (um simples microfone) que produz um sinal eléctrico, que é depois amplificado e registado.

A intensidade do sinal fotoacústico, em condições experimentais adequadas, depende linearmente da densidade óptica, $\alpha = \epsilon c$, obtendo-se directamente o espectro de absorção ao fazer o varrimento dos comprimentos de onda de excitação. O sinal fotoacústico é gerado unicamente pelas espécies que absorvem a radiação de excitação, pelo que não é afectado pela luz dispersa e reflectida.

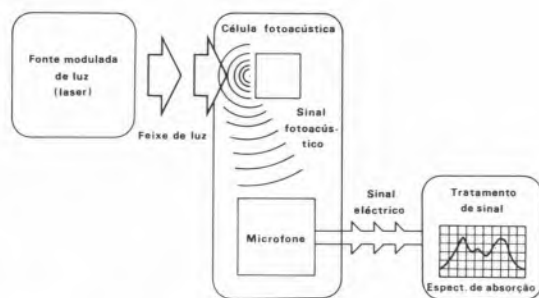


Figura 7. Esquema de blocos de um espectrofotómetro fotoacústico.

5.3. Limitações instrumentais

A radiação electromagnética usada nos espectrômetros e espectrofotômetros é policromática, pois provém da selecção por filtros ou monocromador da radiação emitida por uma lâmpada de espectro contínuo. Estes seleccionam uma banda de radiação mais ou menos estreita em energias, deixando ainda passar luz parasita com energia muito diferente da radiação seleccionada.

5.3.1. Importância da monocromaticidade

O uso de radiação policromática provoca desvios à lei de Beer, pois o coeficiente de absorção molar, ϵ , depende do comprimento de onda da radiação. Na figura 8 apresentam-se três situações para luz composta de 2 comprimentos de onda, verificando-se um aumento do desvio para grandes diferenças entre os valores do coeficiente de absorção molar.

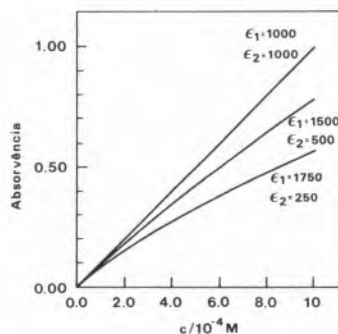


Figura 8. Efeito do uso de radiação policromática (constituída por dois comprimentos de onda) na variação da absorvência com a concentração.

ector
50 100
Micro-
amperímetro
com
stra

De modo a diminuir a influência da policromaticidade na determinação de absorvências, estas devem, sempre que possível, ser efectuadas na região da banda de absorção onde as variações com o comprimento de onda sejam mínimas. Na figura 9 observa-se que, no caso de uma banda de absorção larga, as absorvências no máximo de absorção (região A) seguem a lei de Beer, enquanto na zona lateral da banda (região B) os desvios são significativos.

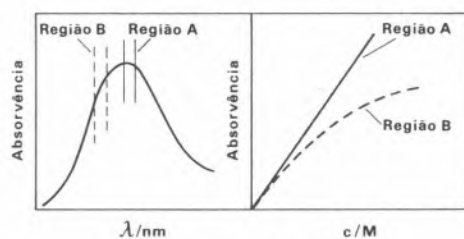


Figura 9. Efeito do uso de radiação policromática da região do máximo da banda de absorção (região A) e da zona lateral (região B) na variação da absorvência com a concentração.

Este problema é importante quando se usam fotómetros (espectrofotómetros) baratos, que não permitem a selecção de uma banda estreita de comprimentos de onda. Por outro lado, a monocromaticidade do feixe de luz, determinada pelas fendas de entrada e saída do monocromador, limita também a resolução do espectro de absorção. A figura 10 ilustra a perda de resolução de um espectro com o aumento da largura de banda do monocromador.

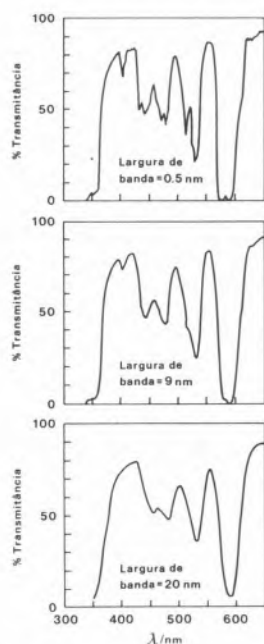


Figura 10. Efeito da largura de banda do monocromador na resolução do espectro de absorção.

Para resolver uma banda de absorção é necessário que a largura de banda do monocromador seja inferior a 10% da largura da banda de absorção. Esta condição pode ser impraticável, pois a diminuição da largura das fendas do monocromador reduz a intensidade do feixe, o que provoca a diminuição da razão sinal/ruído.

5.3.2. Luz parasita

Na presença de luz parasita (luz de comprimento de onda diferente do seleccionado), a absorvência, A_p , é dada por

$$A_p = \log \frac{I_0 + I_p}{I + I_p} \quad (5)$$

onde I_p é a intensidade de luz parasita. Como a intensidade do feixe transmitido é inferior à do feixe incidente ($I < I_0$) e diminui com a concentração, a componente de luz parasita provoca desvios negativos à lei de Beer (fig. 11).

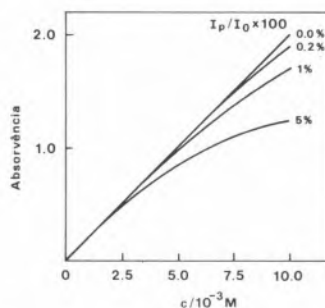


Figura 11. Efeito da luz parasita (I_p) na variação da absorvência com a concentração.

6. DESENVOLVIMENTOS PRESENTES E FUTUROS

O desenvolvimento da espectroscopia de absorção UV-Vis está, em grande medida, associado às suas aplicações analíticas. Substâncias muito variadas, que vão desde os metais aos fármacos, são doseadas por absorção UV-Vis. Verificou-se nos últimos anos um aumento do interesse em processos de doseamento de substâncias orgânicas, em especial as de interesse biológico. A par do desenvolvimento de novos métodos de doseamento, também o tratamento de dados foi significativamente melhorado. Merecem especial referência

os métodos de ajuste, em que são determinadas simultaneamente diferentes substâncias, usando absorvências a vários comprimentos de onda. Neste tipo de análise é, em geral, incorporada a informação das derivadas de várias ordens do espectro de absorção, que permitem uma melhor selectividade [2]. Estes métodos, que também possibilitam aumentar a sensibilidade das determinações, só se tornaram práticos com o advento dos espectrofotómetros de bateria de díodos, e com a vulgarização e expansão dos meios de cálculo.

BIBLIOGRAFIA

1. D. A. Skoog, D. W. West, F. J. Holler, *Fundamentals of Analytical Chemistry*, 6th ed., Saunders College Publishing: New York, 1992.
2. L. G. Hargis, J. Howell, *Anal. Chem.* **64** (1992) 66R.
3. a) F. C. Strong, *Anal. Chem.* **24** (1952) 338. b) M. N. Berberan-Santos, *J. Chem. Educ.* **67** (1990) 757.
4. a) R. C. Denney, R. Sinclair, *Visible and Ultraviolet Spectroscopy*, John Wiley & Sons: New York, 1988. b) H. H. Jaffé, M. Orchin, *Theory and Applications of Ultraviolet Spectroscopy*, Wiley: New York, 1962. c) C. N. R. Rao, *Ultraviolet and Visible Spectroscopy: Chemical Applications*, 3rd ed., Butterworths: London, 1975.
5. H. H. Jaffé, D. L. Beveridge, M. Orchin, *J. Chem. Educ.* **44** (1967) 383.
6. M. L. S. S. Gonçalves, *Métodos Instrumentais para Análise de Soluções*, 2^a edição, Fundação Calouste Gulbenkian: Lisboa, 1990.
7. F. A. Cotton, A. Wilkinson, P. L. Gaus, *Basic Inorganic Chemistry*, 2nd ed., Wiley: New York, 1987.
8. a) A. Rosencwaig, *Anal. Chem.* **47** (1975) 592A. b) J. F. McClelland, *Anal. Chem.* **55** (1983) 89A.

NOTAS

- 1 A intensidade fotónica do feixe de radiação é proporcional ao número de fótons por m^2 e por s, vindo expressa em einstein $m^{-2} s^{-1}$. O einstein representa uma mole de fótons.
- 2 As unidades destas grandezas seguem a tradição enraizada na comunidade científica, que é contrária às recomendações da IUPAC. No sistema de unidades SI recomendado pela IUPAC, o coeficiente de absorção molar vem expresso em $m^2 mol^{-1}$, a concentração em $mol m^{-3}$ e o percurso óptico em m.

³Os espectros destas substâncias são geralmente obtidos a partir da reflectância da amostra.

*Centro de Química-Física Molecular,
Instituto Superior Técnico
1096 Lisboa Codex

ELECTROFORESE CAPILAR WATERS

SOLUÇÕES DE VANGUARDA NAS ANÁLISES IÓNICAS



A MILLIPORE CORPORATION, fabricante de produtos e instrumentação Waters para as ciências de separação, dispõe também de um sistema de ELECTROFORESE CAPILAR-CIA (Capillary Ion Analysis), com as mais elevadas performances na Análise Iónica.

O sistema QUANTA 4000 oferece novas possibilidades nas análises de aniões, catiões e ácidos orgânicos, desde ppb a ppm em tempos de análise muito mais rápidos do que com outros métodos.

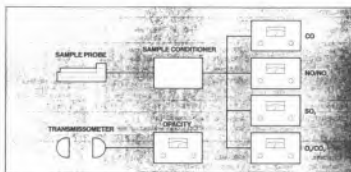
Este sistema consegue sensibilidades e reprodutibilidades nunca dantes atingidas permitindo ainda:

- Identificação de picos de um modo preciso e exacto
- Controlo da temperatura para resultados consistentes
- Análises a 185nm para maiores sensibilidades
- Desenvolvimento de métodos de um modo rápido e automático.

REPRESENTANTE



SOC. TÁC. DE EQUIP. DE LABORATÓRIO, LDA.
Escritório – Rua Duque de Palmela, 30, 1.º G
Telefone 353 72 84 – 1200 LISBOA – PORTUGAL
Armazém e Assist. – Rua S. Filipe Néri, 53, 1.º E
Telefone 68 57 09 – 1200 LISBOA – PORTUGAL



Sistemas de Monitorização e Analizadores de Substâncias Químicas Tóxicas

A THERMO ENVIRONMENTAL é uma firma que desde 1970 se dedica ao fabrico de sistemas de monitorização e analisadores de poluição de ar aprovados pela EPA US. Este fabricante acaba de lançar no nosso mercado o analisador de gás, modelo 1400, que permite a medição das concentrações de NO/NO_x, SO₂, O₂, CO, CO₂ e opacidade.

Contacto:
SOQUÍMICA
 Sociedade de Representações de Química, Lda.
 Rua Coronel Santos Pedroso, 15, 1500 Lisboa
 Tel. (01)7165160 - Fax (01)7165169

Novo Sistema DISCOVERY para Laboratório de R&D de Métodos Cromatográficos



A divisão de cromatografia WATERS dispõe de um novo sistema HPLC (DISCOVERY), constituído pelos mais avançados componentes que proporciona, não só uma maior versatilidade e sensibilidade à investigação, como também à pesquisa e desenvolvimento de métodos.

O DISCOVERY é formado por: (a) sistema de gestão cromatográfica MILLENNIUM 2010; (b) detector de fotodiodos; (c) injector automático e (d) bomba DISCOVERY de gradientes quaternários. Esta combinação foi concebida para assegurar que os resultados atinjam o mais alto nível de detecção e fiabilidade.

A bomba DISCOVERY reduz o volume morto e fornece um fluxo sem a mínima pulsação, permitindo uma excepcional reprodutibilidade e exactidão do gradiente. Pode optar-se pelo circuito de fluxo em aço inox ou Peek (inerte), permitindo a utilização de qualquer tipo de fase móvel ou

amostra. A possibilidade de fluxos extremamente baixos permite a utilização de colunas *microbore*, aumentando a sensibilidade e reduzindo o consumo de solvente.

O injector automático (717) incorpora programas de preparação de amostra, permitindo maior reprodutibilidade entre injeções.

O detector de fotodiodos de alta resolução fornece a mais completa informação sobre as amostras.

Finalmente, no cerne do DISCOVERY, encontra-se o MILLENNIUM 2010, que proporciona a completa gestão dos dados obtidos e o controlo do sistema.

Todos os componentes do DISCOVERY foram concebidos para assegurar a maior reprodutibilidade, exactidão e qualidade. Combinando isto com o software do "system suitability", obtém-se um aumento considerável na produtividade para GLP/GMP (good laboratory-/manufacturing practice) na validação e compilação dos métodos.

Contacto:
LABOMETER - Sociedade Técnica de Equipamento de Laboratório, Lda
 Rua Duque de Palmela, 30 1º F/G, 1200 Lisboa
 Tel. (01)3537284 - Fax (01)3525066

Detectores de Gases, Recolha de Amostras em Fluentes Líquidos e Controlo e Detecção de Poeiras



GASTEC

A emissão de poeiras, fumos, fluentes líquidos e vários tipos de vapores têm uma grande influência na degradação do ambiente. As consequências directas deste facto vão desde acidentes pessoais no local de trabalho, até desastres ecológicos de graves proporções. Actualmente, estão a dar-se grandes avanços no sentido de criar regulamentações, decretos e orientações baseados nos conhecimentos mais recentes dentro desta área evitando a consequências directas anteriormente referidas.

Só o controlo constante, com equipamento rigoroso e de qualidade, de todos os factores permitirá obedecer às novas legislações e garantir a preservação do ambiente. Os equipamentos da GASTEC, QCEC e HUND permitem realizar esse controlo.

Contacto:
EN - Equipamentos de Análise e Ensaios, Lda
 Rua do Real, 1210 A/B, Morlira Guarda, 4470 Maia
 Tel. (02)9486868/47 - Fax (02)9486132



Fotómetro de Chama Digital

O novo fotómetro de chama digital da Advanced Technical Services, modelo ATS 200 MKI oferece fácil operação. Possuindo um sistema automático de selecção de filtros, o instrumento admite ligação a computador, o que permite padronização automática, análise automática de vários elementos bem como ligação a um amostrador também ele automático. O equipamento tem uma elevada estabilidade, permite leituras muito rápidas, com intervalos de 3 segundos e limites de detecção mais baixos do que os equipamentos convencionais deste tipo.

A ATS possui também no seu programa um fotómetro de chama de utilização manual.

Análise de Compostos Voláteis em Alimentos e Bebidas



É crescente a necessidade de qualidade nos alimentos e bebidas que consumimos. Isto não se aplica somente aos aromas dos diferentes produtos, mas também ao tipo de embalagem utilizado. O sistema tipo "purge and trap" da CHROMPAK é um aparelho essencial neste campo, podendo ser utilizado para teste de uma vasta gama de alimentos. Este equipamento, não só fornece informação essencial acerca da pureza e composição de matrizes no estado sólido, tais como peixe, pão, café, tabaco, como também dá indicação sobre os compostos libertados dos materiais da embalagem. Este equipamento permite ainda a determinação do perfil de aromas e bebidas.

O sistema utiliza o cromatógrafo (mod. CP 9001) e um sistema de purga/ratoeira, que permite simultaneamente a concentração da amostra e a injeção directa no cromatógrafo. Com esta combinação consegue-se uma análise precisa para todos os compostos orgânicos voláteis da matriz, na gama de C₂ a C₁₅, com níveis da ordem de ppm, ppb ou ppt.

Todo o sistema é controlado a partir do teclado da unidade cromatográfica, o que permite uma grande flexibilidade. Os parâmetros de operação podem ser armazenados de 12 modos diferentes, podendo ser utilizados quando se deseje. A unidade permite também uma amostrador automático para operação completamente automatizada.

Espectrofotómetros de UV/VIS/NIR



A JASCO lançou recentemente no mercado três novos espectrofotómetros na gama UV/VIS/NIR a complementar o modelo 7800 já existente. As novas unidades são controladas por computador, podendo em opção, usar-se um controlo remoto. Estes aparelhos vêm equipados com fenda variável e possuem: 1, 2 monocromadores, respectivamente, os modelos (V-550 e V-560). A terceira unidade (mod. V-570) cobre a zona do infravermelho próximo com um único monocromador o que permite uma melhor relação sinal/ruído nesta zona de trabalho.

O software disponível é baseado no MS-DOS e permite análise espectral, cinética e quantitativa, admitindo ainda qualquer tipo de impressora (jacto de tinta e laser). Os dados podem ainda ser convertidos em código ASCII para utilização noutros software's disponíveis, nomeadamente em folhas de cálculo.

Novos Espectrofotómetros FTIR



Os novos espectrofotómetros FTIR da JASCO, baseados em unidades já existentes, no que respeita à estabilidade e estanquidade da unidade óptica, permitem agora cobrir as gamas de 15000 a 100 cm⁻¹.

O comando destas unidades é feito por computador, utilizando um programa baseado no Windows 3.1, excepto na versão de mais baixo custo, que, em opção, também pode ser controlado por computador. Com estes novos aparelhos, a JASCO continua a tradição de ser o primeiro fabricante a lançar no mercado japonês os primeiros IR dispersivos, FTIR's e os micro FTIR's (este último com aplicações no ramo da microscopia no IV).

Contacto:
ELNOR - Equipamentos Técnicos
e de Laboratório, S.A.
Rua de Camões, 835-845 - 4000 Porto
Tel. (02)4102505 - Fax (02)4102831

Análises de Vestígios de Mercúrio Automatizadas



O sistema automático FIMS (Flow Injection Mercury System) da PERKIN ELMER, dedicado à análise de vestígios de mercúrio, exibindo dimensões reduzidas e fácil operação, é baseado em técnicas de injeção de fluxo. Este sistema além de rápido e económico permite obter em trabalhos de rotina limites de detecção de mercúrio de 0,01 g/l (relativos) ou 0,005 ng (absolutos). Estes níveis encontram-se abaixo dos valores máximos permitidos em águas potáveis estabelecidos por várias instituições, tal como a US EPA. O sistema FIMS apresenta elevada eficiência em análises de amostras de matrizes complexas. O uso das técnicas de injeção em fluxo reduz os efeitos de matriz e, devido ao facto do Hg ser libertado da matriz, as medições são virtualmente livres de absorção não específica.

O FIMS permite um rendimento até 2 amostras por minuto. Adicionalmente, o amostrador automático (opcional) pode reter até 218 amostras e analisá-las em qualquer sequência que se deseje. O software monitoriza e controla todo o processo, incluindo as recalibrações periódicas e verifica se as análises das amos-

tras estão a ser processadas segundo o protocolo pré-estabelecido das instituições reguladoras.

O sistema FIMS reduz os custos de operação, pelo facto de o consumo de reagentes e de gases de arraste ser inferior aos dos sistemas convencionais de fluxo contínuo. Este sistema permite, como opção, o uso de agentes redutores (SnCl₂ ou NaBH₄) e ainda de KMnO₄ como estabilizante do mercúrio.

Todo este sistema e acessórios são controlados por um computador pessoal em ambiente Windows.

Contacto:
ILC - Instrumentos de Laboratório e Científicos, Lda.
Rua Dr. Álvaro de Castro, 77 - 1600 Lisboa
Tel. (01)7962172 - Fax (01)7937035



Sensor BOD/CBO
ARAS,

Seguro, rápido e Preciso

É hoje aceite que, para caracterizar as água residuais, não é suficiente a determinação individual de um certo número de concentrações. Parâmetros químicos e bioquímicos de tipo global, como a Toxicidade e o BOD/CBO ganharam importância crescente, obrigando a encontrar novos métodos e novas tecnologias. O método convencional de 5 dias para a determinação de BOD/CBO sendo demorado e dispendioso apresenta, por vezes, flutuações significativas.

Ao longo de vários anos de investigação, e de um ano de teste no mercado alemão com elevado sucesso, o laboratório da Dr. LANGE (certificado segundo DIN), acaba de lançar no nosso mercado o ARAS. Trata-se de um aparelho automático de BOD/CBO associado a um sistema de biosensor, no qual microorganismos não prejudiciais à saúde são postos em contacto com a amostra. O aumento imediato da actividade respiratória e, portanto, do consumo de oxigénio em presença de substâncias biodegradáveis, permite a leitura directa do BOD/CBO em mg/l, após 2 minutos, de forma reproduzível (± 5%), mesmo em amostras não filtradas.

Contacto:
LABNORMA, Lda.
Rua Infância Dezaesais, 41 2º - 1200 Lisboa
Tel. (01)692413/4 - Fax (01)656262

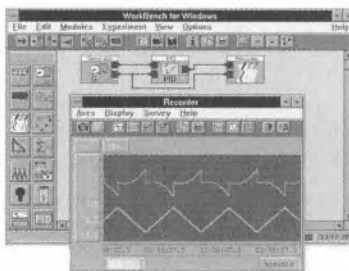


RQflex - Mobilidade Total na Análise de Águas

O novo sistema Reflectoquant da MERCK é constituído por um instrumento de medida-RQflex e por tiras reactivas para análise-Reflectoquant que permitem uma análise quantitativa rápida "in loco".

O reflectómetro RQflex tem capacidade para armazenar 5 métodos em memória, que são facilmente alterados mediante um código de barras. Através do código introduz-se toda a informação relativa ao parâmetro a determinar: nº de lote, calibração específica de cada lote (5 a 10 pontos de calibração), factores de correcção de comprimentos de onda e tempo de reacção. Com o RQflex o operador tem a possibilidade de analisar, entre outros, os seguintes parâmetros: nitratos, nitritos, cloro, peróxidos, sulfatos, sulfitos, ferro, cobre e pH.

Contacto:
MERCK Portuguesa, Lda.
Rua Alfredo da Silva, 3C - 1300 Lisboa
Tel. (01)3621434 - Fax (01)3621445



DATA Shuttle (Aquisição de dados sem esforço)

A *Strawberry Tree* acaba de lançar mais um produto complementando a linha de placas de aquisição de dados analógicas (12 e 16 bits) e digitais. O *DATA Shuttle* é uma caixa ligável à porta de impressora de um PC que proporciona um acesso imediato a dados de transdutores ou de aparelhagem de medida tanto no laboratório como no campo ou num ambiente industrial. A sua configuração, desde que é ligada até

que adquire dados pela primeira vez, leva apenas alguns minutos, graças ao software *Quicklog-PC* incluído. Para as aplicações mais complexas a *Strawberry Tree* tem ainda o software *Workbench-PC* e agora também o *Workbench-PC for Windows*.



CANBERRA InSpecor (Analisador Multicanal Portátil)

A *Canberra Industries* lançou um novo multicanal que pesa menos de quatro quilos com baterias, mantendo toda a funcionalidade de uma estação moderna de espectroscopia. O novo *InSpecor* é uma unidade acoplada a um PC portátil (notebook) que executa o sofisticado software *Genie-PC*, com toda a sua gama de algoritmos de análise de alta robustez. Uma unidade dupla de bateria fornece-lhe energia para um dia inteiro de trabalho. Incorpora ainda um ADC de 8192 canais e um moderno amplificador de espectroscopia com ajuste automático de pólo/zero.

Contacto:
BIODINÂMICA - Biónica Aplicada, Lda
Rua da Guiné, 2.º Esq. - 1100 Lisboa
Tel. (01)8150760 - Fax (01)8150770



Sistema GC/MS da VARIAN

A *varian* apresenta o novo sistema GC/MS, modelo Saturn 3, capaz de atingir níveis de detecção de *picogramas* no modo "espectro total" e de *fentogramas* no modo "gama limitada de massas".

O sistema *Varian Saturn 3 CG/MS* é constituído por um cromatógrafo equipado com coluna capilar e um detector de massa de captura de iões da última geração. As

excelentes características deste aparelho começam na superior qualidade do seu cromatógrafo (*Varian GC star 3400 CX*), que permite não só uma boa separação cromatográfica como boa estabilidade e reprodutibilidade. O detector de captura de iões é constituído por três eléctrodos (superior, anular central e inferior) hiperbólicos, isolados electricamente entre si. No seu conjunto os eléctrodos formam uma câmara de ionização ao centro da qual vem desaguar o efluente da coluna capilar, após atravessar a interface de ligação do cromatógrafo ao detector. A câmara de ionização funciona em alto vácuo pela combinação de uma bomba turbomolecular com uma bomba rotativa. O nível de ionização, conseguido por impacto electrónico, é continuamente monitorizado pelo controlo automático de ganho o que faz com que o feixe electrónico seja pulsado impedindo a saturação da câmara de ionização.

O sistema *Saturn 3* elimina ainda os *efeitos espaciais de saturação* através da modulação axial (a capacidade de recolha de iões é aumentada em cerca de 100x) de que resulta um aumento de sensibilidade sem perda de resolução.

Outra das características deste aparelho é o facto de efectuar 10 varrimentos de massa/segundo, o que significa que mesmo os sinais cromatográficos mais rápidos (picos capilares), são integralmente analisados. Para além da ionização por impacto electrónico o sistema permite a utilização de ionização química sem mudança de hardware.

Contacto:
Emílio de Azevedo Campos & Cª Lda
Rua 31 de Janeiro, 137/145 - 4000 Porto
Tel. (01)3520194 ou (02)2000254
Fax (01)3533382 ou (02)20186242

Aparelho de Absorção Atómica



A *UNICAM* introduziu o novo espectrofotómetro de absorção atómica (*Solaar 939 QZ*) que incorpora simultaneamente a correcção por lâmpada de deutério e por efeito de Zeeman. O forno controla a temperatura mediante fibra óptica, sendo o

sinal processado digitalmente e com "bracketing" assimétrico para máxima precisão. O sistema utiliza cuvettes em grafite o que leva a que a vida útil destas se situe acima das 2000 atomizações.

O espectrofotómetro é controlado por PC e software em ambiente Windows e pode também incluir um software de controlo de qualidade (útil dentro de esquemas GPL ou equivalentes). Todo o sistema obedece aos parâmetros da norma ISO 9000.



Filtros Calibrados e Certificados para Espectrofotometria UV-VIS

No controlo de qualidade dos laboratórios, para a certificação dos mesmos, a calibração periódica dos espectrofotómetros é absolutamente indispensável.

A UNICAM oferece "sets" completos de filtros para verificação da precisão do comprimento de onda e medição da absorvância. Os mesmos são fornecidos com certificados de calibração, onde consta a identificação dos filtros-mãe.

Contacto:
UNICAM - Sistemas Analíticos
Rua Actriz Adelina Fernandes, 13 A/B
2795 Linda-a-Velha
Tel. (01)4142480 - Fax (01)4140357

Extracção Sólido-Líquido



Está a utilizar uma caixa de vácuo com os seus métodos de extracção sólido-líquido? Tem constantemente que verificar o nível de vácuo para evitar que as colunas sequem? Os caudais não são iguais em todas as posições da caixa de vácuo e isto contribui para que tenha recuperações diferentes para a mesma amostra? Está a gastar o seu tempo a fazer todos os passos do método manualmente?

A estação de trabalho BenchMate com o sistema HPSPE (High Performance Solid Phase Extraction) faz a extracção automaticamente de 100 amostras sem utilizar vácuo, com caudais constantes e reproduzíveis e, inclusivé, aumentando as taxas de recuperação. Tudo isto sem a presença do operador. Além disso a estação BenchMate também executa outros passos necessários à preparação das amostras como: pipetagem, adição de reagentes ou padrões internos, cálculo de desidades, agitação e mistura e pesagem das amostras.

(utilize o cartão de RSF marcando o nº 10)

Limpeza de Extractos Alimentares e Ambientais



Os seus extractos têm impurezas com massa molar elevada? Precisa de limpar estes extractos antes de os injectar em GC, GC-MS ou GC-ECD? Está a gastar o seu tempo a fazer esta limpeza manualmente?

A cromatografia de permuta em gel é a técnica normalmente utilizada para fazer esta operação. A estação de trabalho BenchMate GPC executa automaticamente e sem a presença do operador todos os passos preparatórios nos extractos previamente concentrados, por exemplo no TurboVap II, injectando os extractos diluídos na coluna de GPC e recolhendo a fracção pretendida num colector de fracções.

Quando não está a ser utilizada para GPC, aquela estação pode estar a ser usada com outros métodos de limpeza, por exemplo Florisil, ácido ou com outras colunas de extracção sólido-líquido e, para além disso, faz a preparação de amostras com e sem o passo de limpeza.

(utilize o cartão de RSF marcando o nº 11)

Evaporações Rápidas e Eficientes

Está a ter problemas de "espumação" e de "explosão" quando utiliza o evaporador rotativo?

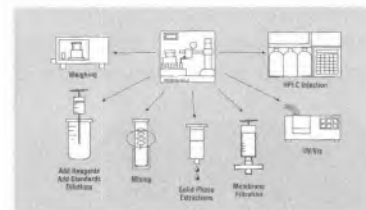
Estes problemas são eliminados se utilizar o concentrador/evaporador TurboVap 500. Este aparelho permite processos de evaporação em escala, com volumes entre 50-500 ml, rápidos e eficientes e sem a presença do operador. As velocidades



de evaporação elevada são obtidas com a utilização do princípio "gas vortex shearing" patenteado pela ZYMARC.

A operação de evaporação/concentração com o TurboVap 500 é totalmente automática. O equipamento dispõe de duas células de evaporação independentes com capacidade para 500 ml cada e ainda a possibilidade de determinar o volume final do concentrado. Isto significa que o operador pode colocar as amostras no aparelho e deixá-lo trabalhar até que o alarme indique que se atingiu o volume pré-determinado. O sistema integral de condensação e recolha de solvente assegura o tratamento ou a eliminação do solvente em segurança.

(utilize o cartão de RSF marcando o nº 12)



Extracção Sólido-Líquido de Poluentes da Água

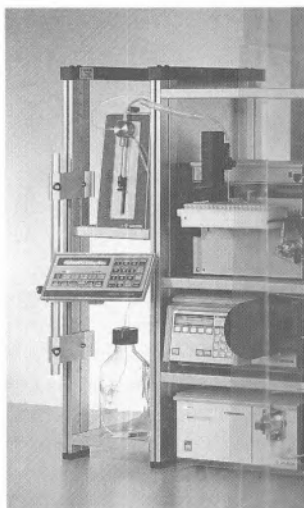
Está a utilizar os métodos de extracção sólido-líquido para extrair e concentrar os poluentes em águas potáveis e residuais? Está a usar a técnica de caixa de vácuo que requer mão de obra intensiva? As suas colunas SPE colmatam sobre vácuo?

Tudo isto se modifica com o AutoTrace SPE, a nova estação de trabalho da ZYMARK. Processa automaticamente e em simultâneo 6 amostras, e em menos de 8 horas trata 24 amostras de 1 l com a intervenção do operador reduzida a 10 minutos. Amostras com 120 mg de sólidos podem ser bombeadas para as colunas de extracção sólido-líquido (SPE) sem alteração de fluxo. O AutoTrace trabalha com as colunas SPE disponíveis no mercado e com volumes de amostra entre 10-2000 ml.

(utilize o cartão de RSF marcando o nº13)

Contacto:
Dias de Sousa, Lda
Quinta da Piedade, lote 15
2625 Póvoa de Sta. Iria
Tel. (01)9592316 - Fax (01)9590813

Cromatógrafo por fluido supercrítico «Gilson»



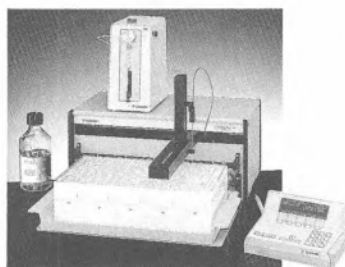
A nova serie SF3 da "Gilson" vem revolucionar toda a cromatografia por fluidos supercríticos ao introduzir a utilização de colunas de enchimento de cromatografia líquida (pSFC).

Contrariamente à cSFC (por colunas capilares) em que a variação de pressão é obtida através da variação do fluxo por um restrictor fixo, o que resulta em perda de

eficiência por não se conseguir automatizar a fase móvel, a série SF3 controla em modo gradiente e com programação independente a pressão, a fase móvel, o fluxo e a temperatura.

Os sistemas da nova série SF3 são totalmente automáticos, combinando a alta velocidade com a resolução (8 picos por minuto), sem grandes custos e mantendo sempre a capacidade de se transformar a qualquer momento em sistemas gradientes de HPLC.

A série SF3 "Gilson" permite a detecção por UV de drogas e metabolitos, pesticidas, polímeros, quirais, etc. com uma reproductibilidade de 0.2 a 1.4% RDS e 1µg/ml de sensibilidade.



Extracção de Fase-sólida ASPEC XL da Gilson

As muitas aplicações por extracção de fase sólida (SPE) incluem extracções de hormonas e drogas de fluidos biológicos, lípidos de extracção de tecidos ou células, PAH's e pesticidas de solos e água.

O novo processador de amostras da Gilson, o ASPEC XL, acondiciona automaticamente a coluna, procede a lavagem com o solvente apropriado e pode injectar a amostra. Este aparelho aceita quaisquer colunas standard de 1,3 e 6 ml.

Usando o seu próprio painel de controle (ou, se se preferir, um computador), o ASPEC XL possui um software que "fala" a sua linguagem. O menu inclui instantaneamente tarefas reconhecíveis que correspondem a operações manuais, como diluir, adicionar reagentes, injectar, etc. Seleciona a tarefa e indica a localização da amostra, após o que basta carregar na tecla RUN.

A sua versatilidade, a não dependência de um tipo ou fabricante de colunas, a variedade de "racks" para tubos de diferentes tamanhos e o volume ilimitado de amostra, tornam o ASPEC XL único no mercado mundial.

Contacto:
 Reagente 5 - Química e Electrónica, Lda.
 Av. Fernão de Magalhães, 481 - 4300 Porto
 Tel. (01)5102694/96 - Fax (01)5102695

CTA - 2000 Atomic Absorption Spectrophometer
Simple Sophistication in Trace Element Analysis



REPRESENTANTE EXCLUSIVO

R5 REAGENTE 5

QUÍMICA E ELECTRÓNICA, LDA.
 Av. Fernão Magalhães, 481 • 4300 PORTO • Apt. 4710 • 4012 PORTO CODEX
 TELS. (02) 5102696 / 5102696 / 5103113 • Fax (02) 5102695
 DELEGAÇÃO:
 RUA ALFREDO RUAS, 51-A • PEDERNAIS • 2675 ODIVELAS • TEL. (01) 9338801

Chem Tech Analytical

CIÊNCIAS FÍSICO-QUÍMICAS

Manuais para o ano lectivo 94/95



LUCINDA MENDONÇA
MARTA RAMALHO



10º
TERESA SÁ

**NOVOS
PROGRAMAS**



ALDA PEREIRA
CONCEIÇÃO GONÇALVES



10º
FILomena CAMÕES
ALDA PEREIRA

**TODOS EM
FORMATO GRANDE!
TODOS A CORES
E PROFUSAMENTE
ILUSTRADOS!**



Texto Editora

Dos éteres-coroa à terapia do cancro

Três décadas de química dos macrociclos

RITA DELGADO *

Desde o início deste século que se conhecem compostos de coordenação contendo ligandos macrocíclicos. No entanto, poucos foram os macrociclos obtidos por via sintética antes dos anos sessenta e, quando isso aconteceu, não era o estudo da química de coordenação destes compostos o objectivo principal da pesquisa. Assim, o macrociclo 1,4,8,11-tetraazaciclotetradecano (Figura 1) foi sintetizado pela primeira vez em 1936 [1], acidentalmente e em pequeníssimas quantidades, mas só quase trinta anos depois se estudaram os seus complexos de cobalto e níquel.

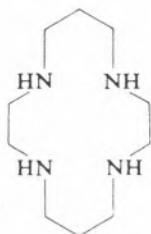


Figura 1 - 1,4,8,11-tetraazaciclotetradecano

ÉTERES-COROA

Foi com Pedersen [2], em 1967, que os compostos macrocíclicos sintéticos tiveram o primeiro grande impulso, através da divulgação de uma nova série, os *poliéteres cíclicos* ou *éteres-coroa*, que foram então sintetizados numa enorme variedade de tamanhos, de número de átomos de oxigénio e de substituintes (ver alguns exemplos na Figura 2). As propriedades especiais de coordenação dos éteres-coroa com iões alcalinos e alcalino-terrosos constituíram o grande foco de interesse. Seguiu-se um rápido desenvolvimento destes compostos e caracterização dos seus complexos, na procura de macrociclos selectivos para certos iões metálicos, adequados a aplicações específicas [3].

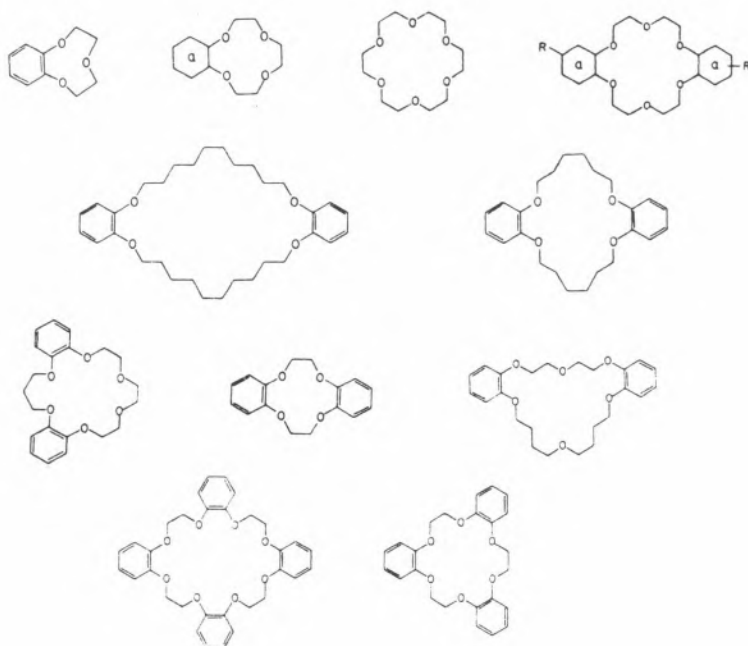


Figura 2 - Alguns exemplos de éteres-coroa sintetizados por Pedersen [2].

a = Benzo ou ciclohexilo; R = H ou t-butilo.

A estabilidade dos complexos formados pelos éteres-coroa com os iões alcalinos e alcalino-terrosos parecia depender de um bom ajuste entre o tamanho do ião metálico e a dimensão da cavidade do macrociclo. Este facto suscitou um enorme interesse dos químicos de coordenação pelos ligandos macrocíclicos, com uma conseqüente procura de compostos com outros átomos doadores, susceptíveis de serem selectivos para outros tipos de iões metálicos. Assim, foram aparecendo macrociclos contendo átomos de azoto, enxofre ou fósforo ou uma qualquer combinação destes.

AMINAS CÍCLICAS E CRIPTANDOS

O grupo de macrociclos mais estudado nas décadas seguintes foi o das aminas cíclicas, contendo azotos

como átomos doadores, entre as quais se destacam as *triaminas* e as *tetraaminas cíclicas*. Na Figura 3 mostram-se alguns exemplos. A investigação não se limitou a ciclos simples e em breve se passou aos *biciclos*, dos quais os *criptandos* sintetizados por Jean-Marie Lehn e colaboradores constituíram os primeiros exemplos [4]. Estes compostos podem acomodar um ião metálico de tamanho adequado, formando complexos de inclusão. Hoje em dia conhece-se uma grande variedade de *polimacrociclos*, com três e mais ciclos, entrelaçados ou não [5]. Nos últimos anos desenvolveu-se, ainda, o interesse pelas associações destes ligandos com variadas moléculas neutras ou iónicas, por constituírem modelos atraentes para a química bioinorgânica [6].

O que torna os macrociclos aliciantes para um químico de coordenação é a facilidade com que se pode alterar o tamanho do anel; modificar a posição e o número dos átomos doadores; alterar a dimensão das cadeias carbonadas

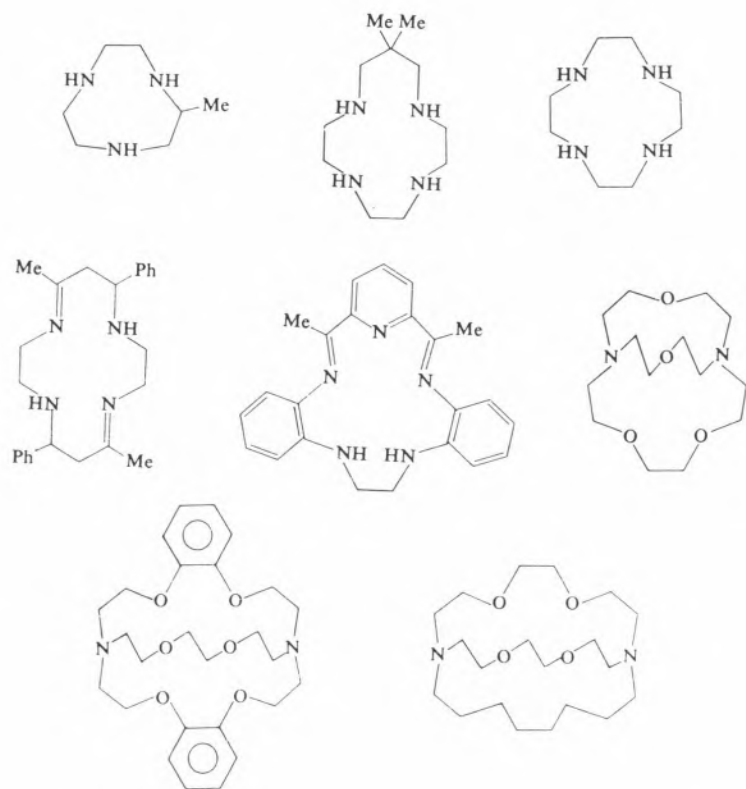


Figura 3 - Algumas aminas cíclicas e criptandos.

entre os átomos doadores; combinar mais de um ciclo ou mesmo o introduzir substituintes diversos nas cadeias do anel ou nos átomos de azoto - alterando assim as suas propriedades complexantes.

A expansão espectacular dos compostos macrocíclicos deu novo fôlego à química de coordenação e ficou assinalada na história da química pela atribuição do prémio Nobel da Química de 1987 a três destacados químicos pelos seus trabalhos nesta área: Jean-Marie Lehn, da Universidade de Strasbourg (França), C. J. Pedersen, investigador da du Pont de Nemours & Co. (EUA) e D. J. Cram, da Universidade da Califórnia, em Los Angeles (EUA).

É claro que é mais fácil conceber estes compostos do que obtê-los no laboratório. Na prática, e na maior parte dos casos, há que contar com vários passos de síntese, alguns de rendimento baixo... Os problemas de síntese são mais dramáticos ainda quando se pretende derivatizar o esqueleto do macrociclo ou introduzir substituintes de tipo diferente nos vários átomos, equivalentes, de azoto.

De entre os muitos macrociclos estudados recentemente que poderia destacar, vou apenas referir um grupo, que tem sido especialmente utilizado em medicina e farmacologia. Trata-se de derivados de macrociclos do tipo tri- ou tetra-aza de pequena dimensão, 9 a 14 átomos no anel. Na Figura 4 estão representados os derivados com substituintes acetato em todos os átomos de azoto, que se popularizaram com as designações de **NOTA** (ácido 1,4,7-triazaciclono-nano-N,N',N''-triacético), **DOTA** (ácido 1,4,7,10-tetraazaciclododecano-N,N',N'',N'''-tetraacético) e **TETA** (ácido 1,4,8,11-tetraazacicotetradecano-N,N',N'',N'''-tetraacético).

APLICAÇÕES À MEDICINA

Estes ligandos podem formar complexos com estabilidade muito elevada. Por exemplo, o **DOTA** forma os complexos mais estáveis que se conhecem com o Ca^{2+} , o Mg^{2+} [7] e os lantanídeos trivalentes [8]. O **NOTA** forma complexos muito estáveis com alguns iões metálicos trivalentes, nomeadamente o Ga^{3+} e o In^{3+} [9]. A elevada estabilidade que exibem os complexos destes ligandos, juntamente com a sua elevada inércia

química (os seus complexos não se dissociam mesmo a pHs muito baixos), tornam-nos atraentes para uma grande variedade de aplicações no campo do diagnóstico de tumores em órgãos e tecidos, terapia de certas doenças e, mesmo, de tumores.

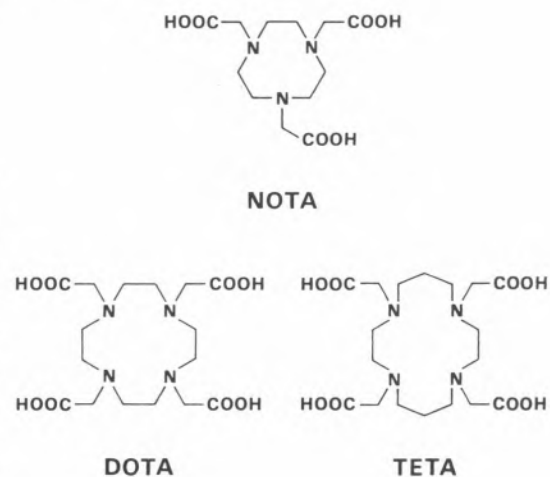
Em diagnóstico

A nível de diagnóstico são utilizados em espectroscopia de ressonância magnética à imagem (RMI), para a qual são especialmente usados complexos de Gd^{3+} [10]. O complexo do **DOTA** com o Gd^{3+} existe já comercializado há alguns anos e é usado como agente de contraste em MRI, por exemplo na detecção de tumores no cérebro. Em radiodiagnóstico, aqueles ligandos, e alguns dos seus derivados, têm sido utilizados como agentes de contraste na forma de complexos com radionúcleos apropriados, nomeadamente o ^{67}Ga (emissão γ $t_{1/2}$ de 80 h, 184 keV), ^{68}Ga (β^+ , $t_{1/2}$ de 68 min.), o ^{111}In (emissão γ $t_{1/2}$ de 68 h, 171 keV), o $^{99\text{m}}\text{Tc}$ (emissão γ $t_{1/2}$ de 6,02 h, 141 keV) e o ^{57}Co (emissão γ $t_{1/2}$ de 270,9 dias, 122,1 keV) [11].

Em terapia

Em terapia, aqueles compostos têm sido testados para retirar dos organismos certos iões tóxicos, como o Fe^{3+} , o Al^{3+} ou o Pb^{2+} . A primeira condição necessária para que possam ser úteis para esta função é formarem complexos de elevada estabilidade com os metais

Figura 4 - Alguns dos mais divulgados derivados acetato de aminas cíclicas.



que se pretendem remover. Estes complexos uma vez formados têm de manter a sua integridade em competição com receptores metálicos naturais existentes nos sistemas biológicos. No entanto, para que os metais possam ser removidos dos meios biológicos, requerem muitas outras condições algumas delas não totalmente compreendidas ou controladas, tais como a permeabilidade membranar ou a rápida excreção por via urinária ou fecal.

O FERRO

O ferro, quando acumulado no organismo humano para além de uma certa quantidade, pode levar à morte. Esta acumulação pode resultar de uma excessiva absorção de ferro por via gastrointestinal (devido a defeito genético) ou por anemia (β -talassémia ou anemia de Cooley) ou devido a repetidas transfusões de sangue (nos pacientes com talassémia ou submetidos a hemodíálises crónicas). Esta doença afecta milhões de indivíduos, especialmente das regiões do Mediterrâneo Norte, da Índia, do Médio Oriente e do Sudeste Asiático. O único tratamento para combater este excesso de ferro e a respectiva anemia, é a remoção daquele elemento com agentes quelantes com especial afinidade para o ferro. O melhor composto até hoje encontrado para este fim é um sideróforo hidroxamato, natural, a desferrioxamina B (DFB), Figura 5. Mas, sendo a DFB um óptimo ligando para o ferro, é, no entanto, ineficaz quando tomado por via oral. Por ser metabolizado no plasma e outros tecidos e não ser absorvido através dos intestinos, tem de ser administrado lentamente e durante um longo período de tempo para ser efectivo, o que constitui um sério problema no tratamento de crianças, que são a quase totalidade dos pacientes com esta doença. Por estas razões, muitos outros ligandos têm sido testados nos últimos anos, nomeadamente um grande número de tri- e tetra-aminas cíclicas, com diversos grupos funcionais nos átomos de azoto, tais como grupos acetato, hidroxamato ou catecolato, sem que se tenha encontrado até hoje o ligando ideal. Na realidade, este terá que reunir características especiais de solubilidade e de tolerância fisiológicas, de baixa toxicidade e, ainda, de elevada estabilidade termodinâmica para evitar a transferência do ferro

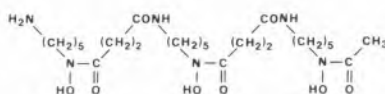


Figura 5 - Desferrioxamina B (DFB), composto usado no tratamento de excessos de ferro e alumínio dos organismos.

para a apotransferrina ou a apoferritina existentes no organismo [12].

O ALUMÍNIO

O alumínio, polarizou as atenções de químicos e médicos, quando se verificou que havia uma excessiva dose daquele elemento nos indivíduos com doença de Alzheimer, embora continue sem se saber se é o alumínio a causa da doença ou se ele aparece como efeito lateral. A DFB, que forma complexos muito estáveis com o Al^{3+} , parece ser também uma droga adequada para o tratamento de intoxicações de alumínio. Em geral, os ligandos adequados para remover o Fe^{3+} também o serão para o Al^{3+} e as investigações têm decorrido em paralelo [13].

O CHUMBO

O chumbo, em organismos intoxicados, foi dos primeiros metais a ser removido por tratamento clínico com compostos de coordenação. No início, o tratamento que consistia na administração do sal dissódico de EDTA (ácido etilenodiaminatetraacético), levava a sérias doenças musculares e à morte do paciente, devido à simultânea remoção do cálcio. Este problema foi ultrapassado com a administração do complexo de cálcio de EDTA. No entanto, o EDTA tem também elevada afinidade para outros metais de transição existentes nos organismos, em muito pequenas quantidades, e que são igualmente removidos por aquele ligando. Interessava encontrar ligandos bastante mais selectivos para o chumbo e mais uma vez os ligandos macrocíclicos, especialmente os que contêm átomos de oxigénio e azoto no anel, têm sido testados [14].

EM RADIOTERAPIA

Mais recentemente tem-se desenvolvido um novo domínio que tem entusiasmado equipas de químicos e biólogos empenhados na *terapia de cancro*. Neste campo têm-se utilizado complexos bifuncionais de ^{90}Y , ^{67}Cu e ^{212}Bi , ou seja, radioisótopos com radiações não-penetrantes, β^- e α , de vida-média curta. O complexo diz-se bifuncional porque o ligando portador do radionuclídeo, na forma do seu complexo, está, também, ligado covalentemente a um anticorpo monoclonal, que dirige o agregado assim formado para o correspondente antígeno (o tumor), com considerável selectividade. Avanços de engenharia genética permitiram não só gerar anticorpos para antígenos específicos, mas também incorporar aminoácidos ou sequências de aminoácidos nesses anticorpos que permitem a ligação de um radionuclídeo. A elevada selectividade do anticorpo para um dado antígeno só se consegue se o anticorpo se ligar rápida e fortemente ao tumor-associado, e tenha sido irreversivelmente marcado com o radionuclídeo apropriado. A selecção do anticorpo está condicionada pelo tipo de doença e é um trabalho para equipas de biologia molecular. A selecção do complexo que contém o radionuclídeo compete a químicos, orgânicos e inorgânicos - cabe-lhes sintetizar e ligar ao anticorpo um ligando funcionalizado, com estrutura adequada ao radionuclídeo, que com ele forme complexos com estabilidade (termodinâmica e cinética) adequada nas condições fisiológicas, para que atinja o alvo desejado, sem se perder no percurso. Na realidade, o radiofármaco tem de atravessar regiões de baixo pH, como o estômago e o fígado e no soro a concentração de alguns metais é elevada (por exemplo, $[Ca^{2+}] = 1,25 \text{ mM}$ e $[Zn^{2+}] = 10^{-5} \text{ M}$) [11]. Os primeiros trabalhos nesta área começaram por usar derivados de ligandos lineares, como do EDTA e do DTPA (ácido dietilenotriaminapentaacético) [15]; estes ligandos formam complexos bastante estáveis, ao pH fisiológico, mas os seus complexos de cobre, índio e ítrio são protonados a pHs mais baixos, sofrendo dissociação catalisada por ácidos ou outros cátions. Mais recentemente, têm sido testados derivados do **NOTA**, **DOTA**, e **TETA** (ver alguns exemplos na Figura 6) [16];

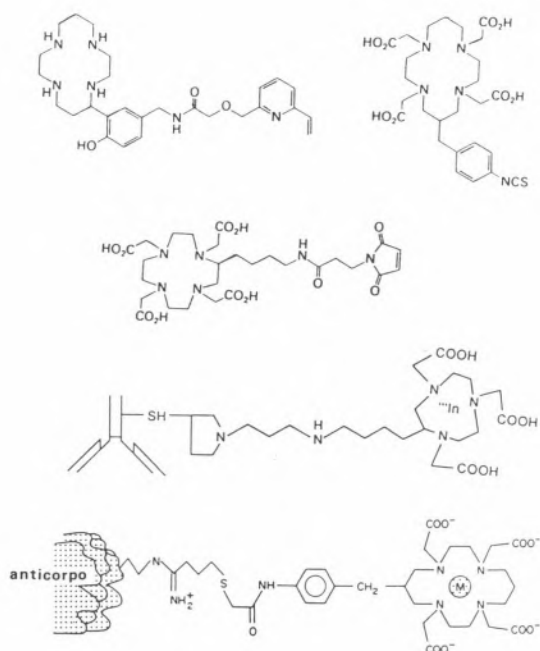


Figura 6 - Alguns dos compostos bifuncionais que têm sido usados em radioterapia de tumores. Nos três primeiros exemplos, representam-se só os ligandos macrocíclicos [16d], e nos últimos dois os complexos ligados a anticorpos monoclonais [16e], [18].

embora continuem algumas experiências com derivados lineares [17]. Em todos os casos estudados o íon metálico fica basicamente encapsulado pelo ligando e, portanto, impedido de se complexar com os potentes ligandos biológicos existentes *in vivo*; o complexo tem grande inércia química e os níveis de toxicidade são baixos. Os ligandos macrocíclicos parecem, assim, mostrar-se promissores para o radiodiagnóstico e para a radioterapia de certos tumores. O campo está em aberto, muito há ainda a investigar...

[1] J. van Alphen, *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **55** (1936) 835.

[2] C. J. Pedersen, *J. Am. Chem. Soc.*, **89** (1967) 2495, 7017.

[3] J. J. Christensen, D. J. Eatough e R. M. Izatt, *Chem. Rev.*, **74** (1974) 351.

[4] B. Dietrich, J.-M. Lehn e J.-P. Sauvage, *Tetrahedron Lett.*, (1969) 2885, 2889.

[5] Em número anterior do *Química*, nesta mesma secção, já se referiram alguns destes macrociclos em forma de laços e nós, sintetizados por Sauvage e colaboradores: M.E. Minas da Piedade, *Química*, **49** (1983) 46.

[6] R. M. Izatt, K. Pawlak, J. S. Bradshaw e R. L. Bruening, *Chem. Rev.*, **91** (1991) 1721.

[7] R. Delgado e J. J. R. Fraústo da Silva, *Talanta*, **29** (1982) 815; S. Chaves, R. Delgado e J. J. R. Fraústo da Silva, *Talanta*, **39** (1990) 249.

[8] M. F. Loncin, J. F. Desreux e M. Merciny, *Inorg. Chem.*, **25** (1986) 2646, W. P. Cacheris, S. K. Nickle e A. D. Sherry, *Inorg. Chem.*, **26** (1987) 958.

[9] E. T. Clarke e A.E. Martell, *Inorg. Chim. Acta*, **181** (1991) 273.

[10] R. B. Lauffer, *Chem. Rev.*, **87** (1987) 901.

[11] S. Jurisson, D. Berning, W. Jia e D. Ma, *Chem. Rev.*, **93** (1993) 1137.

[12] A. E. Martell, R. J. Motekaitis, I. Murase, L. F. Sala, R. Stoldt, C. Y. Ng, H. Rosenkrantz e J. J. Metterville, *Inorg. Chim. Acta*, **138** (1987) 215.

[13] A. E. Martell, *Biol. Trace Elem. Research*, **21** (1989) 295.

[14] K. V. Damu, M. S. Saikjee, J. P. Michael, A. S. Howard e R. D. Hancock, *Inorg. Chem.*, **25** (1986) 3879.

[15] a) M. W. Brechbiel, O. A. Gansow, R. W. Archer, J. Schlom, J. Esteban, D. E. Simpson e D. Colcher, *Inorg. Chem.*, **25** (1986) 2772; b) C. F. Meares, *Acc. Chem. Res.*, **17** (1984) 202.

[16] a) S. V. Deshpande, S. J. DeNardo, C. F. Meares, M. J. McCall, G. P. Adams, M. K. Moi, e G. L. DeNardo, *J. Nucl. Med.*, **29** (1988) 217; b) J. R. Morphy, D. Parker, R. Alexander, A. Bains, A. F. Carne, M. A. W. Eaton, A. Harrison, A. Millican, A. Phipps, S. K. Rhind, R. Titmas e D. Weatherby, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, (1988) 156; c) D. Parker, J. P. L. Cox, J. R. Morphy e K. J. Jankowski, *Pure Appl. Chem.*, **61** (1989) 1637; d) D. Parker, *Chem. in Britain*, (1990) 942; e) P. J. Marsden, F. A. Smith e S. Mather, *Appl. Radiat. Isot.*, **42** (1991) 815; f) A. Harrison, C. A. Walker, D. Parker, K. Jankowski, J. P. L. Cox, A. S. Craig, J. M. Sansom, N. R. A. Beeley, R. A. Boyce, L. Chaplin, M. A. W. Eaton, A. P. H. Farnsworth, K. Millar, A. T. Millican, A. M. Randall, S. K. Rhind, D. S. Secher e A. Turner, *Nucl. Med. Biol.*, **18** (1991) 469.

[17] M. W. Brechbiel e O. A. Gansow, *Bioconjugate Chem.*, **2** (1991) 187.

[18] C. F. Meares, *Nucl. Med. Biol.*, **13** (1986) 311.

*Centro de Química Estrutural
Instituto Superior Técnico

O Clube de Software da SPQ (1ª parte)

JOÃO PAULO LEAL*

A SPQ tem adquirido uma quantidade significativa de *software* na área da Química, com especial relevo para os programas educacionais. Sendo os programas adquiridos até ao presente mais de uma centena, não é possível fazer na rubrica de *Software* uma análise detalhada de cada um deles. Alguns serão comentados nesta rubrica mas, para que os sócios saibam quais os programas que se encontram na Sociedade, apresenta-se agora uma primeira lista dos programas existentes (relembra-se que estes programas estão instalados no Clube de *Software* na sede da SPQ, onde podem ser consultados pelos sócios). Nesta lista seguiu-se a seguinte metodologia: nome, classificação e breve resumo das potencialidades do programa. A classificação constará de três itens: qualidade do programa (5- Muito bom, 4- Bom, 3- Regular, 2- Fraco, 1- Muito Fraco); adequação escolar (A- 8º e 9º anos, B- 10º a 12º anos, C- Universitário) e conhecimentos de inglês necessários (III- Elevado, II- Médio, I- Fraco). Uma classificação deste tipo, embora muito geral e dependente da opinião do autor destas linhas, poderá elucidar sobre a adequação, ou não, de um dado programa às necessidades dos sócios. Devido à grande diversidade e quantidade dos programas apresentados pelo *Project Seraphim*, os mesmos serão divididos por temas, de modo a facilitar a sua consulta.

CHEMICAL EDUCATION SOFTWARE:

PROGRAMAS PARA IBM PS/2 OU PC COMPATÍVEIS.

HPLC-An Instrument Simulator (4,C,II) - Trata-se, tal como o nome indica, de um simulador de um sistema de HPLC. Proporciona de um modo simples, e económico, um acesso à maioria das funções de um aparelho real.

KC? Discoverer (4,B,II) - Tabela periódica com dados para bastantes propriedades dos elementos e permitindo uma muito variada representação das mesmas (p. ex. umas em função das outras).

The Acid-Base Package (3,B,II) - Conjunto de programas sobre titulações ácido-base e de complexação. Foi analisado em detalhe no "*Química*, 49, 42".

Spec20 (4,C,I) - Simulação de um espectrofotómetro Spectronic 20. Foi analisado em detalhe no "*Química*, 50, 67".

Notebook: A Column Calculator and Plotter (3,B,I) - Trata-se de uma pequena folha de cálculo e programa de gráficos de grande facilidade de utilização.

Mass Spec Simulator (4,C,I) - O programa efectua a simulação de um espectrómetro de massa Varian EM-600. O utilizador pode, como no aparelho real, ajustar os controlos habituais (amplitude do espectro, gama de massas, massa inicial, ...).

Alkimers (4,B,I) - Sobre o tema dos isómeros de alcanos o programa faz de tudo um pouco, desde tutoriais sobre nomenclatura e detecção de isómeros até exercícios para averiguar as capacidades do utilizador nesta matéria. Foi analisado em detalhe no "*Química*, 51, 63".

Equilibrium Calculator (3,B,I) - Calcula as concentrações no equilíbrio para um máximo de 5 reagentes e 5 produtos, sendo conhecidos os coeficientes estequiométricos, as concentrações iniciais e a constante de equilíbrio.

EPR Simulation (4,C,I) - Simula espectros de RPEE e efectua o respectivo tratamento.

PROJECT SERAPHIM:

PROGRAMAS PARA IBM PS/2 OU PC COMPATÍVEIS.

Medidas e Tratamento de dados:

Significant Figure Drill (3,B,I) - Exercícios de treino em que o utilizador pode rever e praticar o conceito de algarismos significativos.

Dimensional Analysis (3,B,I) - Possibilita ao estudante a revisão das unidades fundamentais no sistema métrico, usando o método do factor unitário.

Significant Figures and Rounding

(5,A/B,II) - Permite o treino de arredondamentos, contagem de algarismos significativos e medições e cálculo com algarismos significativos.

LSquare (3,B/C,I) - Efectua uma regressão linear pelo método dos mínimos quadrados com ponderação. Requer uma tabela de valores *t* de Student e estimativas do erro para os valores de *y*.

Nomenclatura e Fórmulas Químicas:

Empirical Formula (3,B,II) - Simulação laboratorial da determinação da percentagem de KClO_3 em várias amostras.

Name the Ions (3,B,III) - Vários exercícios sobre nomenclatura de iões.

Quiz on Molar Masses (2,A,I) - Exercícios em que, dados o nome e a fórmula de um composto se escolhe a sua massa molar de entre um conjunto de quatro possibilidades.

Valence Drill (2,B,I) - Exercícios em que dados os nomes dos iões é pedida a carga.

Nomen (4,B,III) - Tutorial sobre nomenclatura em Química Orgânica.

Molecular Weight Calculator (4,A/B,I) - Efectua o cálculo da massa molecular de compostos.

Equações Químicas e Estequiometria

Excess (3,B,I) - Dadas as quantidades de reagentes (ácido e base) determina o número de moles do reagente em excesso e o pH da solução final.

Mole Calculations (3,A,I) - Cálculo de átomos, moles, massas e volumes. Adequado para exercícios em grupo.

Moles in Space (2,A,I) - Exercícios sobre moles.

Mole Demo (3,A,I) - Cria uma pilha com uma mole de folhas de papel. Um relógio permite observar o tempo gasto na tarefa.

Mole Drill (2,A,I) - Cálculo de moles conhecendo as massa atómicas relativas.

Balancing Equations Drill (3,A,I) - Exercícios de acerto de equações

químicas. O programa indica se os coeficientes estequiométricos estão ou não correctos.

Limiting Reagent (3,B,I) - Exercícios sobre reagentes limitantes em reacções redox. O programa fornece auxílio e classifica o desempenho do utilizador.

Drill on Mole Concept (2/3,A,I) - Cálculo de número de moles, de moléculas, de átomos e respectivas massas.

Stoichiometry (3/4,A/B,I) - Programa tutor na resolução de problemas de cálculos estequiométricos.

Inorgm (4,A-B,II) - O programa apresenta pares de reagentes sendo pedido ao utilizador que indique a possibilidade de existir reacção, quais os produtos e que acerte a reacção que representa o processo.

Balance (3,A,I) - Indicando as fórmulas dos produtos e dos reagentes de uma reacção o programa fornece a reacção química certa.

Estrutura Atómica

Hydrogen (2,B,I) - Representação das soluções da equação de Schrodinger para o átomo de hidrogénio.

Black Box (3,B,I) - Simulação da experiência de Rutherford. O utilizador deve tirar conclusões baseado nas trajectórias de saída de projecteis que atravessam uma caixa negra.

Spectral Lines Experiment (2,B,I) - Calcula os comprimentos de onda das linhas espectrais do hidrogénio numa experiência simulada.

Milikan's Oil Drop Experiment (4,B,I) - Simulação do cálculo da carga elementar através do equilíbrio de uma gota de óleo carregada electricamente.

Dot Orbitals (5,B,I) - Representação gráfica da densidade de probabilidade associada aos vários tipos de orbitais atómicas.

Orbital Electron pensity Contours (5,B,I) - Representação dos contornos de densidade dos vários tipos de orbitais atómicas.

Electron Cloud Diagram (5,B,I) - Representação gráfica da núvem electrónica.

Soluções

PAN - Perrin's Avogadro's Number (3,B,I) - Simulação da experiên-

cia de Perrin que permite determinar o número de Avogadro a partir do movimento Browniano. (Para se tirar partido do programa é fundamental consultar a documentação anexa).

Concentration Quiz (3,B,I) - O utilizador é desafiado a colocar por ordem de concentrações várias soluções, para as quais os dados são fornecidos de diferentes modos.

Rast 2 (4,B,I) - Simula uma experiência para a determinação da massa molar através do abaixamento crioscópico.

Molarity (3,B,II) - Gera problemas para o cálculo da molaridade de soluções e verifica o resultado.

Solubility (3,B,I) - Jogo em que um ou mais utilizadores recebem cartas que representam iões em solução. A finalidade é combiná-las para formar precipitados ou libertar um gás da solução.

Gases

Boyle (4,B,I) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Boyle.

Boyle's Law Simulation (3,B,I) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Boyle usando livros e uma seringa. Permite a aquisição de dados para cada estudante.

Charles (3,B,II) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Charles.

Gas Laws (4,B,II) - Tutorial sobre as leis dos gases.

Baloon (4,B,I) - Ilustra o efeito da variação da pressão e da temperatura no volume de um balão cheio com um gás ideal. Utiliza gráficos de barras para mostrar a proporcionalidade (directa ou inversa) entre as várias grandezas.

Gas Law 7 (3,B,II) - Simulação laboratorial de uma experiência em que o utilizador pode manipular o número de moles, o volume a temperatura ou pressão. Fixando duas destas variáveis pode-se então ver qual a relação entre as outras duas.

Boyle's Law - Lab Calculation (2,B,II) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Boyle utilizando uma seringa e livros (usa os resultados do programa "Boyle's Law Simulation". Determina valores médios a partir de medidas e inclui questões sobre desvio médio das medidas.

Dalton (4,B,II) - O utilizador mani-

pula um gás num contentor fechado de modo a atingir uma determinada pressão. Pode ser utilizado como uma simulação ou como um jogo.

Gas Law 542 (3,A,II) - Simulação laboratorial de uma experiência em que o utilizador pode manipular o número de moles, o volume a temperatura ou pressão. Fixando duas destas variáveis pode-se então ver qual a relação entre as outras duas. Sendo semelhante a "Gas law 7" foi concebido para níveis mais elementares.

Maxwell (4,B,I) - Um utilitário para desenhar distribuições de Maxwell-Boltzman para gases ideais. Permite sobreposição de gráficos.

Gas Laws (3, B, II) - Problemas práticos sobre as leis dos gases.

Molecular Speed Distributions (3,B,I) - Usando as equações da distribuição de Maxwell-Boltzman, mostra graficamente a variação da distribuição de velocidades moleculares com a temperatura.

Equilíbrio Químico

Equilibrium Simulation (3,B,II) - Simula equilíbrios químicos e traça as variações de concentração dos reagentes e produtos ao longo do tempo.

An Equilibrium Simulation (2,B,I) - Simulação gráfica usando o sistema $H_2 + I_2 = 2HI$. O utilizador fornece as concentrações iniciais das três espécies e observa a evolução para o equilíbrio.

Equilibrium Tic-tac-toe (3,B,I) - Jogo do galo entre dois jogadores em que questões sobre equilíbrio têm que ser respondidas acertadamente para que uma dada casa seja ocupada.

Reacções Redox - Electroquímica

Redox Game (3,B,I) - Jogo que possibilita a prática da leitura de tabelas de potenciais de eléctrodo de modo a descobrir reacções redox espontâneas.

Nernst (4,B,I) - O programa gera problemas de cálculo do potencial de células.

Faraday 2 (4,B,I) - Simula a lei de Faraday numa experiência laboratorial. É usado em conjunto com o programa "Faraday aid".

Faraday Aid (3,B,I) - Permite a análise dos resultados obtidos com o programa "Faraday 2".

Complexos de Metais de Transição

Relationship of Isomers (3,C,I) - Apresenta dois complexos de estrutura octaédrica com seis ligandos escolhidos aleatoriamente. O utilizador deve determinar se são idênticos, isómeros geométricos ou enantiómeros.

Isomers (4,C,I) - Desenha duas estruturas tetraédricas, trigonais, bipiramidais ou octaédricas. O utilizador deve determinar se são idênticas, isómeros geométricos ou enantiómeros.

Análise Qualitativa

Precipitation Game (3,C,I) - São fornecidos cinco cátions e dez aniões. Pretende-se formar precipitados de modo a se gastarem todos os cátions.

CANAL(1,2,3) (3,C,II) - Testes aos estudantes para os grupos 1, 2 e 3 do sistema QUAL.

CANAL(4,5) (3,C,II) - Testes aos estudantes para os grupos 4 e 5 do sistema QUAL.

Six Solution Problem (2,B-C,I) - Simula o problema de determinar a composição de seis soluções, misturando-as entre si. Pretende-se saber qual das soluções se encontra em que tubo.

Nine Solution Problem (3,B-C,I) - Simula o problema de determinar a composição de nove soluções, misturando-as entre si. Pretende-se saber qual das soluções se encontra em que tubo.

Química Orgânica

Hydroc (2,B,I) - Dado o nome IUPAC de um dado hidrocarboneto, o programa desenha a sua fórmula estrutural.

Organic Qualitative Analysis (3,B,II) - Simula o processo de identificação de compostos desconhecidos através de testes, medidas e análises.

Stereochemistry (4,B,I) - Introduce de uma maneira simples os conceitos de isomeria óptica, centros quirais, etc. Possui um programa tutor que sugere exercícios para a prática dos conceitos ensinados.

Cyclohexane Stereochemistry (3,B,I) - Introduce a distinção entre as posições equatoriais e axiais no ciclohexano e propõe exercícios para a prática desta classificação.

Phenyl Bromide (2,C,I) - Progra-

ma para prevêr quais as reacções que o brometo de fenilo sofre em determinadas condições ou com determinados reagentes.

Benzene Chemistry (4,C,I) - Permite praticar a estratégia da síntese de derivados benzênicos, desde sínteses com um único passo até cinco passos.

Química de Polímeros

Polymerlab (4,C,III) - O utilizador deve identificar um polímero desconhecido através de experiências tais como espectros de infravermelhos, calorimetria diferencial de varrimento (DSC), dispersão da luz, etc. (Requer GW-BASIC ou BASICA.) Apresenta-se como um jogo de aventuras.

Química Nuclear

Dice Throw Simulation (2,C,I) - Simulação laboratorial sobre decaimento radioactivo com cinética de ordem 1.

AGRADECIMENTO

O autor agradece ao professor João Carlos Sousa (Pólo DEFCUL do Projecto Minerva) as sugestões sobre a classificação da adequação escolar.

* Dep. Química, ICEN-INETI,
Sacavém



UMA GRANDE ESCOLA;
UMA GRANDE LIVRARIA;
Barata Técnica

Av. Rovisco Pais . 1000 Lisboa . Telf. 847 34 21 (ext 1853)
De Segunda a Sexta das 9 às 21 horas

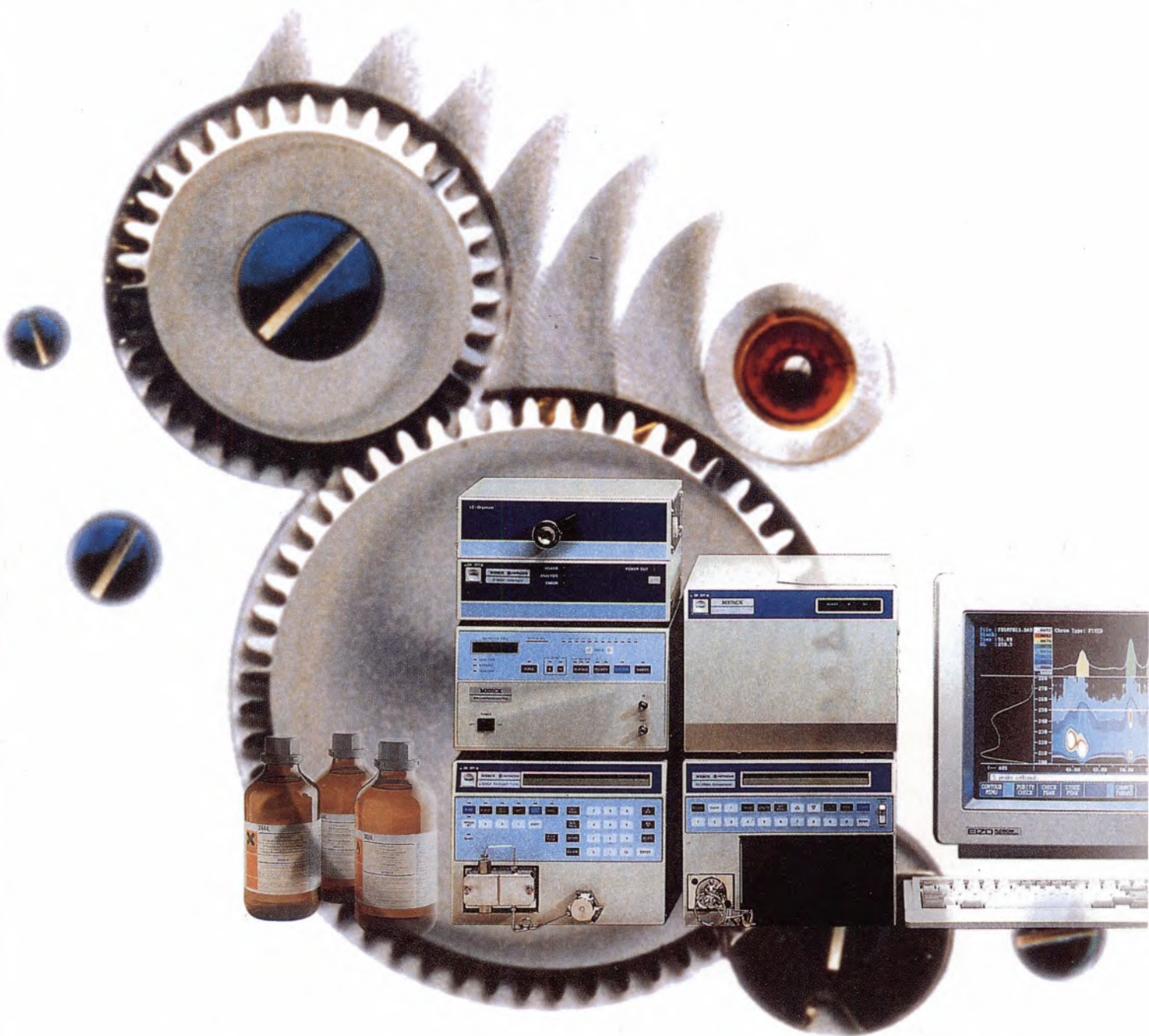
Que ciência mais útil?

O motivo mais forte por que os homens se entregam ao estudo de qualquer ciência, é a sua utilidade. (...) As artes químicas, que dependem da nossa ciência, são as de fazer azulejos, louça grossa, fina e a porcelana, que consistem na preparação, e mistura de diferentes argilas, dando-lhes ao fogo uma dureza conveniente; a arte de fazer vidros, arte preciosa, cujo descobrimento tem sido para os homens da maior utilidade; a Metalurgia, arte de extrair, fundir, purificar e ligar os metais uns com os outros; a arte de fazer vinho, não só das uvas mas de outras muitas substâncias vegetais; de fazer o vinagre e de extrair o espírito de vinho; as partes aromáticas e corantes dos vegetais, que nos servem de tinta: a Tinturaria, arte de tingir diferentes corpos; as artes de surrar e curtir peles, de chapeleiro, etc., a arte da panificação, e até a mesma arte de cozinhar; a Mineralogia, ciência que ensina a conhecer perfeitamente todas as substâncias minerais; a Agricultura, o Comércio, pois ensina a conhecer a melhoria, cultura e factura dos géneros; a Farmácia, que ensina a preparar os medicamentos; enfim a Medicina, ciência inapreciável que trata da nossa conservação. O Médico não pode conhecer a natureza das partes sólidas, e fluídas do nosso corpo, nem a virtude de um grande número de medicamentos, nem aplicá-los, sem o socorro da Química. Que ciência mais útil?

in "Elementos de Química" de Vicente Coelho de Seabra, Coimbra, 1788

Os Nossos Produtos são o Seu Sucesso

- LiChroGraph[®] – *Sistemas de HPLC de acordo com as GLP*
 - LiChrolut[®] – *Extracção sólido-líquido*
 - LiChrospher[®] – *Colunas de HPLC para todas as aplicações*
 - LiChrosolv[®] – *Solventes de HPLC de qualidade gradiente*



MERCK... O seu parceiro de Qualidade

Merck Portuguesa Lda.
R. Alfredo da Silva 3-C
1300 Lisboa
Telf. 362 14 34
Fax. 362 14 45