

EDITORIAL	2
NOTICIÁRIO SPQ	
Medalhas na XVI Olimpíada Ibero-Americana de Química	3
9º Encontro do Grupo da Química dos Glúcidos	4
III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica	5
III Simpósio Internacional AMONET (III ISA) – Mulher, Ciência e Globalização – Realizado na Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 17-18 Outubro 2011	6
Glycosciences in the International Year of Chemistry	7
ITQB PhD Students' Meeting	9
Grupo Químicos Jovens	10
10º Aniversário do Programa TrainMiC® Assinalado em Franca Expansão	10
Assembleia Geral da EuCheMS - Belgrado, 13-14 Outubro 2011	11
Prémio Nobel da Química 2011: atribuído pela descoberta dos quase-cristais	12
Fernando Manuel Ramôa Cardoso Ribeiro (Funchal, 04/10/1945 - Lisboa, 29/08/2011)	14
ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA & CENTENÁRIO SPQ	
Um Ano de Química – O Ano Internacional da Química <i>Joaquim Luís de Faria</i>	17
Diário do Ano Internacional da Química	18
O Ano Internacional da Química Comemorado pelos Químicos da Centenária FCUP	25
Acácia Mimosa – A Essência de uma Praga	26
LIVROS E MULTIMÉDIA	
Haja Luz! Uma História da Química Através de Tudo	29
Michael Faraday, A História Química de uma Vela	30
ENTREVISTA	
Mário Nuno Berberan e Santos – Presidente da Sociedade Portuguesa de Química	
Entrevista conduzida por Helder Gomes e Carlos Baleizão	33
ARTIGOS	
100 Anos da Química em Portugal sob os Auspícios da SPQ Parte I. O papel do Congresso de Karlsruhe de 1860 na estruturação da Química como uma ciência moderna <i>Augusto Correia Cardoso e Sebastião J. Formosinho</i>	37
Perspectivas da Química Computacional <i>Fernando M.S. Silva Fernandes</i>	47
QUÍMICA E ENSINO	
Dos Quês aos Porquês no Ensino da Química <i>Victor M.S. Gil</i>	55
Análise da Verdura das Actividades Laboratoriais do 11º Ano do Ensino Secundário <i>Dominique A. Costa, M. Gabriela T.C. Ribeiro e Adélio A.S.C. Machado</i>	63
WEBQUEST	
WebQuest: "Investigando a Chuva Ácida" <i>M. Rosário Beleza, João Paiva, Carla Moraes</i>	73
QUÍMICA PARA OS MAIS NOVOS	
<i>Marta C. Corvo</i>	77
DESTAQUES	81
AGENDA	84

Entrevista

33

No número do Centenário da SPQ, entrevistamos o Professor Mário Nuno Berberan e Santos, actual Presidente da SPQ.



ARTIGO

37

O papel do congresso de Karlsruhe, a primeira parte de uma série de quatro artigos sobre 100 anos de Química em Portugal.



Química e Ensino

55

A curiosidade exprime-se através de diferentes tipos de perguntas. Quês e Porquês desempenham um papel central no avanço da química.





Helder Gomes
bquimica@ipb.pt
www.spq.pt

Chegados ao final de mais um ano, é tempo de balanços e de previsões para 2012. O ano de 2011 ficará na memória dos químicos portugueses pelo Ano Internacional da Química e pelo Centenário da SPQ, foram inúmeras as actividades que decorreram um pouco por todo o país, conforme fomos divulgando nas páginas do QUÍMICA, e que se irão prolongar por 2012. Infelizmente, 2011 ficará também marcado pela crise económica e financeira que o país e a Europa enfrentam, o ano em que, pela primeira vez em democracia, os salários e/ou subsídios de Natal de milhões de portugueses foram reduzidos. No editorial que escrevi há um ano atrás, transmiti a dificuldade que nos esperava em 2011 e anos vindouros, mas a mensagem era de esperança. Concretizadas as previsões, espera-nos agora um 2012 mais austero, com medidas que terão inevitavelmente repercussão social. Os funcionários públicos que auferem mais de 1000 euros não receberão subsídio de férias e de Natal, o orçamento em Educação diminui mais de 600 milhões de euros, o equivalente a oito por cento do orçamento total do sector. Residem dúvidas sobre a Ciência, o financiamento dos Centros de Investigação e a renovação dos contratos dos Investigadores. O sentimento geral é de apreensão, mas a minha mensagem continua a ser de esperança e de encorajamento. É importante resistir às adversidades, ganhar força e dar a volta por cima, pois as boas notícias também são catalisadores de recuperação. E a Química surge neste contexto como a única ferramenta capaz de ultrapassar os problemas globais do nosso planeta relacionados com a alimentação, saúde, energia e ambiente. A União Europeia incentiva o desenvolvimento nestas áreas, associadas à inovação, acções geradoras de crescimento e emprego, visando a transferência dos resultados obtidos do laboratório directamente para a economia. É nosso papel, como membros de uma Sociedade de Química, contribuir também neste sentido, incentivando Jovens a seguir uma carreira na área da Química, desde o ensino básico e secundário, por intermédio dos seus professores e das actividades de divulgação que se promovem cada vez mais nas Instituições de Ensino Superior, incentivando o empreendedorismo de base tecnológica, motivando Jovens doutorados e investigadores a comercializar as suas ideias e inovações, estreitando a relação entre Instituições de Ensino Superior e Empresas e dinamizando o desenvolvimento de projectos geradores de novos produtos e processos. Mais do que nunca as sociedades modernas dependem do Ensino e da Ciência. Estamos cá para contribuir com o nosso valor.

Este número deve chegar às suas mãos poucos dias antes da data em que a SPQ celebra o centenário da sua fundação. Foi no dia 28 de Dezembro de 1911 que um grupo de químicos portugueses, entre eles Ferreira da Silva, que a SPQ foi fundada. Este número é por isso, com toda a naturalidade, dedicada ao Centenário da SPQ e à Química em Portugal. Para aludir a este tema, quisemos falar com o Professor Mário Nuno Berberan e Santos, actual Presidente da SPQ, para dar a conhecer melhor os projectos da nossa Sociedade. Nesta entrevista falamos um pouco sobre o passado, mas principalmente sobre o futuro da SPQ e o papel da Química nos novos desafios que o mundo enfrenta. Iniciamos também a publicação de uma série de quatro artigos sobre 100 anos de Química em Portugal sob os auspícios da SPQ. Este primeiro artigo faz o enquadramento do nascimento da SPQ no panorama da química europeia, recuando até ao século XVIII e evidenciando o papel do Congresso de Karlsruhe de 1860 na estruturação da Química como uma ciência moderna. Os 100 anos de Química em Portugal acompanharam também as fortes evoluções tecnológicas ocorridas durante o século XX, entre elas o advento dos computadores, surgindo com naturalidade a Química Computacional. Poderá encontrar também neste número um artigo sobre Química Computacional, onde se divulgam aspectos essenciais, suas aplicações e alguns desenvolvimentos em Portugal e perspectivas futuras.

Como separata deste fascículo, distribuímos uma tabela periódica com as novas massas atómicas definidas pela IUPAC no início deste ano, cuja apresentação reflecte uma mudança de postura na expressão do conceito de massa atómica, que será abordada num artigo a publicar no número seguinte na habitual secção de Questões de Nomenclatura. Recordo que se pretende que esse espaço no boletim seja dinâmico, pelo que encorajamos o envio de questões sobre o tema, que tentarão ser respondidas por membros das comissões de nomenclatura.

Aproveito a oportunidade para lhe desejar Boas Festas e um próspero 2012!
Boa leitura!

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Propriedade de

Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870 - 1180
Registo na ERC n.º 125 525
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 123, Outubro - Dezembro 2011

Redacção e Administração

Av. da República, 45 - 3.º Esq.
1050-187 LISBOA
Tel.: 217 934 637
Fax: 217 952 349
bquimica@ipb.pt
www.spq.pt

Editor

Helder Gomes

Editores-Adjuntos

Carlos Baleizão
Carlos Folhadela
Joana Amaral
João Paiva

Comissão Editorial

Jorge Morgado
Hugh Burrows
Joaquim L. Faria
Ana Lobo
M. N. Berberan e Santos,
A. Nunes dos Santos

Publicidade

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

Design Gráfico e Paginação

Paula Martins

Impressão e Acabamento

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

Tiragem

1700 exemplares

Preço avulso

€ 5,00
Assinatura anual - quatro números
€ 18,00
(Continente, Açores e Madeira)
Distribuição Gratuita aos sócios da SPQ

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

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

A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração podem ser encontradas no fascículo Janeiro-Março de cada ano e no sítio web da SPQ.

Publicação subsidiada pela

FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E ENSINO SUPERIOR

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

MEDALHAS NA XVI OLIMPÍADA IBERO-AMERICANA DE QUÍMICA

Apesar das façanhas da Química não serem objecto de grande destaque nos meios de comunicação social de maior difusão, mais uma vez, os estudantes portugueses viram o seu desempenho na Olimpíada Ibero-Americana de Química recompensado com medalhas. A delegação portuguesa, este ano constituída somente por três alunos, regressou a Portugal com três Medalhas de Bronze na bagagem.

Os medalhados foram o Vasco Figueiredo Batista, que estudou no Agrupamento de Escolas de Carregal do Sal, o João Miguel Pereira, ainda a estudar na Escola Secundária D. Inês de Castro de Alcobaça e o Paulo Sérgio Gonçalves, que estudou na Escola Secundária Alves Martins, de Viseu.

Todos os estudantes da equipa portuguesa tiveram provas francamente positivas, mas numa competição deste tipo a possibilidade de ganhar uma medalha depende da prestação do conjunto de todos os estudantes.

De referir que o João Miguel Pereira ganhou a Medalha de Ouro na Olimpíada de Química+ deste ano, cuja final se realizou em Maio, na Universidade de Aveiro, e foi noticiada no número 122 deste Boletim.

A preparação dos participantes nas Olimpíadas Internacionais e nas Olimpíadas Ibero-Americanas de Química está sediada no Departamento de Química da Universidade de Aveiro desde 2002 e conta com a colaboração de uma equipa alargada. Neste ano lectivo, a preparação – que se estendeu de Outubro de 2010 a Julho de 2011 – teve a participação dos docentes do Departamento de Química da Universidade de Aveiro Amparo Faustino, Diana Pinto, Graça Marques, Maria Clara Magalhães e Rita Ferreira. Esta equipa contou ainda com a colaboração de Alzira Rebelo (docente do Colégio dos Carvalhos). A colaboração da Prof. Alzira Rebelo e do Colégio dos Carvalhos – que acolheu os alunos nos seus laboratórios – foi particularmente relevante na preparação dos alunos em técnicas laboratoriais básicas. De



Equipa portuguesa que conquistou três Medalhas de Bronze na XVI Olimpíada Ibero-Americana de Química

acordo com o regulamento das Olimpíadas Ibero-Americanas “os estudantes participantes poderão ser treinados por professores universitários por um período máximo de 120 horas” o que é estritamente cumprido em Portugal. Para além dos docentes referidos, os alunos contam também com o apoio dos próprios professores das escolas que frequentam. Esses são também parte integrante do sucesso dos alunos, pois sem um ensino de qualidade os alunos não teriam tido o sucesso que tiveram, tanto nas provas nacionais, como nas internacionais.

Os três alunos desta equipa mostraram, ao longo do ano de preparação, um empenhamento digno de registo, do qual resultou a homogeneidade nos resultados finais. Mais uma vez se comprova que, apesar do empenhamento de todos os docentes envolvidos na preparação dos alunos, o empenhamento e motivação de cada um deles é determinante para o seu sucesso pessoal. As provas são individuais, pelo que o mérito é também individual e resulta de muitas horas de estudo de Química, para além de todas as tarefas lectivas que os alunos têm que cumprir.

Esta 16ª edição da Olimpíada Ibero-Americana de Química decorreu de

16 a 24 de Setembro, na Cidade de Teresina, capital do Piauí, no nordeste brasileiro, promovida pela Universidade Federal do Piauí como um dos eventos incluídos na celebração dos seus 40 anos de existência, e juntou 52 estudantes do ensino secundário de 14 países ibero-americanos: Argentina, Bolívia, Brasil, Colômbia, Costa Rica, Cuba, El Salvador, Espanha, Guatemala, México, Perú, Portugal, Uruguai e Venezuela. Este ano esteve ausente das provas o Chile, mas esteve presente, pela primeira vez como observador, o Paraguai, com uma delegação enérgica e motivada, que alegrou muitos dos momentos de convívio dos mentores e organizadores.

As Olimpíadas de Química são actividades promovidas pela Sociedade Portuguesa de Química (www.spq.pt) com o patrocínio do Ministério da Educação e da Universidade de Aveiro que visa (i) dinamizar o estudo e ensino da Química nas Escolas Básicas e Secundárias, (ii) proporcionar a aproximação entre as Escolas Básicas e Secundárias e as Universidades, e (iii) despertar o interesse pela Química, cativando vocações para carreiras científico-tecnológicas entre os estudantes. Este ano, um dos alunos inscreveu-se numa Licenciatura em Química, o que esperamos comece a ser

uma atitude regular dos participantes nas Olimpíadas de Química, visto que esta é também uma das funções deste evento. Este não é caso único mas, ao longo dos 12 anos de participação portuguesa nas Olimpíadas de Química, não há muitos alunos que tenham escolhido esta área do conhecimento como actividade profissional.

Maria Clara Magalhães e Diana Pinto
(mclara@ua.pt)
Mentoras da equipa portuguesa



Os membros da equipa portuguesa com o reitor da Universidade Federal do Piauí, o organizador do evento e um senador do Piauí

9º ENCONTRO DO GRUPO DA QUÍMICA DOS GLÚCIDOS

Entre os dias 4 e 7 de Setembro de 2011, a Escola de Ciências da Vida e do Ambiente da Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, em Vila Real, teve o prazer de acolher o 9º Encontro Internacional do Grupo da Química dos Glúcidos da Sociedade Portuguesa de Química. Este ano, em parceria com a Real Sociedade Espanhola de Química, realizou-se simultaneamente o 5th Iberian Carbohydrate Meeting, organizado localmente por membros do Departamento de Química. Este evento contou com a presença de 102 participantes, oriundos de 21 universidades e institutos de investigação de Portugal e Espanha, bem como oradores convidados do Reino Unido, Irlanda, Alemanha, França, Holanda, Estados Unidos e Canadá. Foram proferidas 14 lições plenárias, 8 palestras

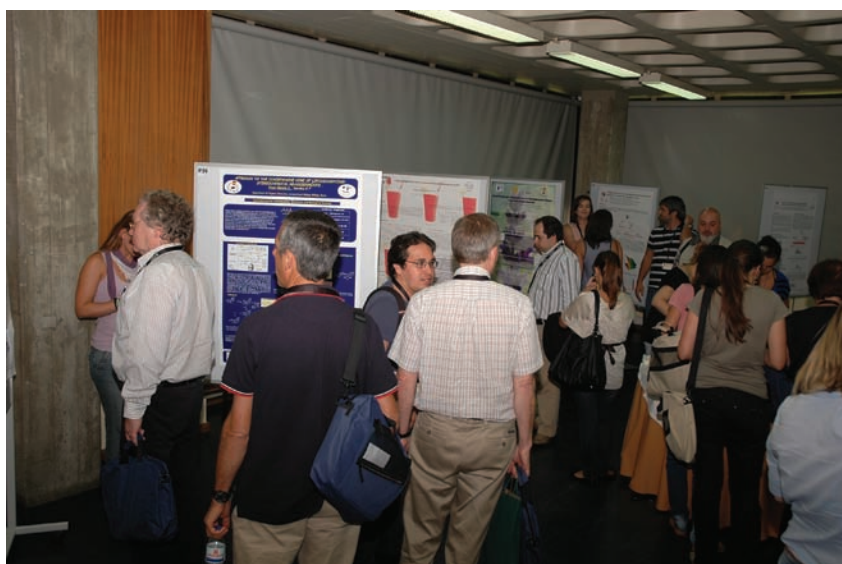
convidadas, 11 comunicações orais e 40 comunicações em poster.

Este evento serviu como ponto de encontro entre os investigadores que desenvolvem a sua actividade de investigação nas glicociências, quer na sua vertente química, quer biológica, para a divulgação, partilha e discussão dos resultados científicos mais recentes nesta área, bem como as tendências actuais.

O programa científico teve início no domingo, dia 4, com uma lição plenária proferida pelo Professor Richard Schmidt da Universidade de Konstanz, Alemanha, intitulada *New aspects of glycoside bond formation*, seguida da lição plenária proferida pelo Professor José Maria Fernandez-Bolanos da

Universidade de Sevilha, Espanha, intitulada *Glycorandomization based on alkoxyamines*. No segundo dia foram realizadas mais cinco lições plenárias, intituladas: *Recent advances of iminosugars as anticancer agents*, proferida pela Professora Inmaculada Robina da Universidade de Sevilha, *Approaches towards glycoconjugate vaccines based on synthetic cryptococcus neoformans CPS structures*, pelo Professor Stefan Oscarson da University College Dublin, *Unique α -glucan structures synthesized by novel bacterial trans-glucosylating enzymes*, proferida pelo Professor Johannes Kamerling do Bijvoet Center for Biomolecular Research, Utrecht, Holanda, *Modulation of biological responses with synthetic glycoconjugates*, proferida pelo Dr. Geert-Jan Boons, do Complex Carbohydrate Research Center da University of Georgia, USA e *Structural features of thermally treated mannan and galactan oligo and polysaccharides – implications in roasted food products*, proferida pelo Professor Manuel António Coimbra da Universidade de Aveiro.

No dia 6 de Setembro foram realizadas mais cinco lições plenárias, sendo de destacar a lição plenária proferida pelo Professor Jesús Jiménez-Barbero (The Roy L. Whistler International Award in Carbohydrate Chemistry 2010) do Centro de Investigaciones Biológicas CIB-CSIC de Madrid, intitulada *The specific interaction of sugars with biomolecules. A 3D view by using NMR*, bem como as lições plenárias intituladas *Glycosidic bicyclic lactones*:



Apresentações em forma de painel

synthesis and uses towards pseudo glycoconjugates, proferida pelo Professor Yves Queneau, Inst. Chim. Biochim. Moléculaire et Supramoléculaire de Lyon e *Awakening and rise of a dormant function. From glucosinolates to thio-imidate N-oxides*, proferida pelo Professor Patrick Rollin, University of Orléans. Foi ainda proferida pelo Dr. Cristobal Lopez, do Instituto de Química Orgânica General (CSIC), a lição plenária intitulada *Design of synthetic routes to novel carbohydrate-based templates* e, pela Professora Júlia Costa da Universidade Nova de Lisboa, a lição plenária intitulada *Role of glycans in the central nervous system*.

No último dia de trabalhos foram proferidas mais duas lições plenárias, pelo Dr. Váron Silva, do Max-Planck Institute of Colloids and Interfaces da Alemanha, intitulada *Glycosylphosphatidylinositol (GPI's) and GPI-anchored proteins: synthesis and applications*, e a lição plenária de encerramento proferida pelo Professor Bruce Grindley, da Dalhousie University do Canadá, intitulada *Glycodendrimers as anti-adhesion drugs and vaccines*. As lições plenárias nos três dias foram intercaladas por lições convidadas, bem como por comunicações orais realizadas por jovens investigadores, tendo sido também reservado um pe-

ríodo significativo para as comunicações em forma de painel. De forma a incentivar os jovens investigadores para a área das glicociências, por deliberação da Comissão Científica, em conjunto com todos os oradores convidados, foram atribuídos prémios de melhor comunicação oral e melhor comunicação em forma de painel a Ana Rita Jesus da Universidade de Lisboa, com a comunicação intitulada *Synthesis of natural c-glycosyl isoflavones*, e a Ana Oliete da Universidade de Sevilha, com a comunicação intitulada *Alkoxyamine mediated synthesis of new glycoclusters*, respectivamente.

Pela diversidade de tópicos e elevada qualidade das palestras apresentadas, pela participação entusiasta de estudantes e jovens investigadores, apraz-nos registar que este encontro se saldou por um grande êxito científico e organizativo.

A comissão organizadora agradece empenhadamente a todas as instituições e empresas que apoiaram a realização do evento.

Fernando Nunes
(fnunes@utad.pt)
Comissão Organizadora



Fotografia de grupo dos participantes no Glupor9

III JORNADAS IBÉRICAS DE FOTOQUÍMICA

As III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica decorreram de 4 a 7 de Setembro de 2011, nas instalações da Universidade de Granada, no Campus da Cartuxa. O encontro foi organizado pelo Prof. José M. Álvarez Pez, na altura Presidente do Grupo Espanhol de Fotoquímica, e contou com a presença de cerca de 120 participantes de várias nacionalidades.

O encontro fez jus ao carácter transversal das áreas da Fotoquímica e da Fotobiologia, tendo contado com a participação de oradores internacionais de renome, bem como de alguns promissores jovens investigadores, que cobriram temas tão variados como a espectroscopia, fluorescência, microscopia, nanopartículas, corantes naturais e sintéticos, fotofísica, foto-

química orgânica, fotocatalise, etc. Os temas foram abordados em duas comunicações plenárias, oito comunicações convidadas, vinte e quatro comunicações orais e cerca de sessenta comunicações em painel.



A plenária de abertura foi proferida pelo Doutor David Klenerman, Professor da Universidade de Cambridge, com o tema *“New biological insights from single molecule studies”*, tendo a segunda apresentação plenária, *“Mechanisms and applications of pho-*

tobridgings of biomolecules by Ru(II) complexes” sido proferida pelo Doutor André Kirsch-De Mesmaeker, Professor da U. L. de Bruxelas. Como é tradição na série, o encontro contou com um animado programa social, que muito contribuiu para um melhor conhecimento de todos os participantes. Destacaram-se uma visita nocturna ao Alhambra, um passeio às típicas aldeias rurais das Alpujarras na Serra Nevada, e um jantar com vista sobre o Alhambra.

A edição deste ano deu continuidade à série de encontros conjuntos do Grupo Espanhol de Fotoquímica e do Grupo de Fotoquímica da SPQ, iniciada em Santiago de Compostela em 2003, a que se seguiu o de Faro em 2007. Estas jornadas ibéricas têm



Participantes nas III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica realizadas em 2011, em Granada

alternado com a série de encontros nacionais de Fotoquímica, iniciados em Coimbra, em 1974. Tal situação vai agora alterar-se com a aprovação, pelo Grupo Espanhol de Fotoquímica, de uma proposta do seu congénere Português no sentido de fundir definitivamente os encontros nacionais de Fotoquímica dos dois países, passando estes a estar integrados nas Jornadas Ibéricas, que se passarão a realizar bianualmente, de forma alternada nos dois países. A próxima edição das Jornadas Ibéricas de Fotoquímica terá então lugar em Portugal, em 2013. O leitor está desde já convidado a participar!

José Paulo Farinha
(farinha@ist.utl.pt)

Instituto Superior Técnico

III SIMPÓSIO INTERNACIONAL AMONET (III ISA) – MULHER, CIÊNCIA E GLOBALIZAÇÃO

Realizado na Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 17-18 Outubro 2011



A globalização traduziu-se, quer em impactos positivos, quer negativos, para as comunidades de mulheres, provavelmente resultando numa ligeira melhoria da integração destas na economia de mercado.

No contexto da actual crise global, a economia apresenta-se como a componente mais visível, e ao mesmo tempo mais desafiadora, que dificulta a integração das mulheres. O paradigma neoclássico da teoria económica levou a uma lacuna no sistema, incapaz no presente momento de fornecer os instrumentos que possam neutralizar o acentuado declive de decrescimento, ou contribuir para mercados e sociedades sustentáveis.

Ainda assim, comprovou-se que a igualdade de género constitui uma faceta da economia inteligente, porque

gera ganhos de produtividade, fornece a necessária força de trabalho e conduz a uma melhoria do caminho para o desenvolvimento.

Uma análise do estado da arte das condições enfrentadas pelas mulheres com qualificações mais elevadas, em matéria de emprego, salário, reconhecimento e *ganho de poder*, põe em evidência uma persistente e elevada diferença entre os sexos. Além disso, indicadores preocupantes demonstram que, em diversas áreas, esta diferença tem aumentado, em lugar de diminuir, nos últimos cinco anos.

A paridade de género está longe de ser alcançada, considerando os três pilares de poder da sociedade – executivo, legislativo e judiciário. Na esfera política, os progressos na realização de um equilíbrio de género têm sido em geral insuportavelmente lentos, mantendo-se em menos de 30% os assentos do parlamento ocupados por mulheres, ou em posições ministeriais. Além disso, os ministérios ocupados por mulheres apresentam em geral um portfólio de baixo impacto económico, tais como os assuntos sociais e questões relacionadas com a saúde. No sector privado, as mulheres que ocupam cargos com poder de decisão são ainda menos frequentes.

As mulheres na esfera científica reconhecem a sua responsabilidade como actores de mudança, tanto a nível individual, como numa escala global, considerando em especial as gerações mais jovens.

O associativismo feminino organizado, que começou no século 19, promoveu uma identidade feminina e pavimentou o caminho que permite que as mulheres de hoje possam continuar a trabalhar para consciencializar e acelerar o ritmo de redução do diferencial de género. As redes através da ciência constituem um instrumento eficiente para promover o *ganho de poder* das mulheres, exemplificado pela implementação de projectos internacionais, como BASNET, nos países bálticos.

As actividades da Fundação Europeia da Ciência têm como objectivo avançar e explorar novas direcções para a Ciência Europeia. Entre elas, os estudos sobre mulheres são centrais para as carreiras académicas das mulheres, fornecendo uma plataforma para operações estratégicas conjuntas e pela sinergia de capacidades complementares.

As mulheres que participaram no III Simpósio Internacional AMONET,

apoiado pela Sociedade Portuguesa de Química, reconhecem que:

- A importância de mulheres modelo e mentoras poderá contribuir decisivamente para melhorar as condições das mulheres e deverá constituir uma acção prioritária.
- Será necessária uma profunda mudança de perspectiva para garantir a sustentabilidade do planeta e das sociedades humanas.
- É necessário, em particular, a incorporação de uma dimensão de género no novo modelo económico. Isto deverá incluir a expansão da economia social e solidária, com o objectivo de substituir a actual, baseada em valores patriarcais, que nos últimos séculos contribuíram para aprofundar as disparidades de género.
- Apesar de tudo, muitos processos encorajadores e sinais de mudança evoluíram ao longo da última década e devem ser enfatizados. Entre eles, o recém-publicado Relatório do Banco Mundial – 2012, e a iniciativa de organizar a *First European Gender Summit*, que teve lugar em Bruxelas (8-9 Novembro 2011), são iniciativas de importância fundamental.

AMONET deseja agradecer calorosamente a participação das mulheres e homens no III ISA, fazendo votos para que os seus contributos encontrem expressões nas mudanças que se impõem à sociedade em geral e à vida

económica e de progresso científico em particular.

Florbela Pereira
(florbela.pereira@fct.unl.pt)
Comissão Organizadora



Sessão de abertura do III Simpósio Internacional da AMONET



Mesa redonda subordinada ao tema "Género, Trabalho, Família e Educação"

GLYCOSCIENCES IN THE INTERNATIONAL YEAR OF CHEMISTRY

Este Ano Internacional da Química, que coincidiu com o centenário do segundo prémio Nobel de Maria Skodowska Curie, foi também o ano em que se celebrou o centenário da Sociedade Portuguesa de Química, do Instituto Superior Técnico da Universidade Técnica de Lisboa, da Universidade de Lisboa e da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. Esta instituição foi a anfitriã do workshop "Glycosciences in the International Year of Chemistry - Applications to Human Health and Disease", realizado de 8 a 10 de Setembro de 2011 e financiado pela ESF EuroGlycoForum Research Network, da qual Portugal faz parte por decisão da Fundação para a Ciência e a Tecnologia. Neste evento reunimos oradores de excelência de variados países (Portugal, Espanha, Itália, França, Reino Unido, Irlanda,

Alemanha, Suíça, Suécia, Noruega, Polónia, Holanda, Canadá e Japão), que apresentaram os resultados mais recentes da investigação desenvolvida nas áreas da Glicoquímica e da Glicobiologia. Os temas abordados focaram tópicos inovadores sobre vacinas, interações de hidratos de carbono e proteínas, gliconopartículas e aplicações biomédicas, glicodendrimeros como potenciais fármacos anti-adesão, bem como estudos relacionados com o cancro, a diabetes, as doenças infecciosas e do sistema nervoso central. A síntese de diversos tipos de moléculas, desde iminoaçúcares com aplicações terapêuticas a miméticos carbocíclicos de açúcares, derivados da glucose com interesse para a diabetes tipo 2, síntese e aplicações de glicoporfirinas, glicolípidos, glicanas com interesse biológico,

entre outros, demonstrou o potencial dos hidratos de carbono em química medicinal.

A comissão organizadora, que teve à sua responsabilidade a escolha dos 33 oradores convidados, reuniu investigadores de várias instituições do ensino superior, nomeadamente a Universidade de Lisboa, a Universidade Nova de Lisboa, o Instituto Politécnico de Santarém, a Universidade da Beira Interior e a Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro.

Foi dado um relevo muito particular à participação de jovens cientistas e de estudantes, pois a qualificação dos nossos jovens passa não só pelo nosso esforço na sua formação, mas também pelas novas oportunidades que para eles criamos, de forma a

construírem um país inovador e produtivo. Organizámos uma sessão de *posters*, para a qual foi nomeado um júri internacional que escolheu o melhor *poster* em termos de qualidade científica e abrangência do trabalho, tendo sido premiada a doutoranda Triinu Visnapuu do Department of Genetics, Institute of Molecular and Cell Biology, University of Tartu na Estónia, com o *poster* intitulado “Mutants of Levansucrase LSC3 from *Pseudomonas syringae* PV. Tomato With Altered Polymerization Properties”.

O programa integrou também uma Mesa Redonda, constituída por jovens cientistas já doutorados e especializados em Glicoquímica – Nuno Xavier, pós-Doc na University of Natural Resources and Life Sciences, Áustria; Marta Andrade, pós-Doc em Portugal, e em Glicobiologia – Angelina Palma, Pós-Doc no REQUIMTE, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa; Gonçalo Bernardes, Academic visitor da Oxford University, EMBO e Novartis Research Associate; João Rodrigues, Vice-Presidente da Associação Nacional de Investigadores em Ciência e Tecnologia, Instituto de Higiene e Medicina Tropical, Universidade Nova de Lisboa; Vanessa Ferreira, Presidente da Associação Portuguesa CDG e outras Doenças Metabólicas Raras, Centro Regulación Genómica, Barcelona, Espanha e a doutoranda Triinu



Prof. Dr. Richard Schmidt, convidado de Honra, reconhecido internacionalmente como um investigador de Excelência na área, recebeu, entre muitos outros prémios, o primeiro *Emil Fischer Carbohydrate Award* (2009) e o *Claude S. Hudson Award for Carbohydrate Chemistry* pela ACS (2011)

Visnapuu da Estónia. Nela participaram também representantes da indústria farmacêutica – Dr. Guy Villax, Hovione e Dr. Manuel Fernandes, Atral-Cipan, o representante da unidade de transferência de conhecimento da Universidade de Lisboa – Dr. Nuno Silva, UL-INOVAR, os Secretários da Real Sociedad Española de Química – Prof. Jesus Jimenez-Barbero e da ESF Euroglycoforum Research Network - Dr. Anthony Merry, bem como a Presidente da comissão organizadora do evento. Esta Mesa Redonda contribuiu para apresentar alguns dos jovens cientistas na área e estabelecer um fórum de discussão entre os participantes e os membros da Mesa.

Neste workshop pretendemos criar um momento de Ciência e também de cultura Portuguesa. Neste contexto foi com o maior prazer que oferecemos um espectáculo de dança contemporânea intitulado “Substâncias”, inspirado na Química, em particular na estrutura e propriedades de sete elementos, dançado pelo Quorum Ballet com coreografia de Daniel Cardoso, que utilizou brilhantemente a linguagem corporal para unificar a Ciência e a Arte.

Foi no Castelo de S. Jorge que, ao entardecer, bebendo um moscatel de Setúbal, os participantes puderam admirar a cidade de Lisboa, com toda a sua beleza e magia. O jantar seguiu-se com o bacalhau típico da gastronomia portuguesa, animado com fados cantados pelos jovens artistas Miguel Marques da Gama e Maria Teresa da Câmara Fonseca, neta de Vicente da Câmara, acompanhados por Luís D’Orey Roquette à viola e Bernardo Romão à guitarra portuguesa. Foi de facto um momento especial, muito apreciado por todos!

Finalmente, a excursão a Sintra incluiu a visita e jantar no Palácio da Pena, um momento de história de Portugal, ao qual não faltou a nostalgia que surgiu ao caminhar em volta do Palácio iluminado e envolvido pela neblina característica da região, que marcou todos os que nela participaram.

Estamos muito gratos aos 150 delegados deste Encontro, pela sua participação. Muito em particular agrade-

ceamos a todos os alunos e colaboradores que gratuitamente trabalharam para a organização deste evento e se empenharam em torná-lo inesquecível pela sua eficiência e dedicação. Agradecemos também a todos os patrocinadores, nomeadamente à ESF EuroGlycoForum Research Network, à Universidade de Lisboa e ao Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, que patrocinaram o evento, permitindo a exibição do Quorum Ballet. À Direcção da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa agradecemos todo o apoio e o serviço de qualidade prestado pelo secretariado, serviços técnicos e associação dos trabalhadores, que em muito contribuíram para o sucesso deste evento. Dirigimos um agradecimento muito especial à Direcção da Sociedade Portuguesa de Química, que reconheceu a importância deste workshop e o apoiou desde o início, não podendo deixar de exaltar a excelência do seu secretariado.

Agradecemos também à Royal Society of Chemistry, que aceitou em dedicar a este evento o volume 37 de *Specialist Periodical Reports Carbohydrate Chemistry – Chemical and Biological Approaches*, editado com contribuições dos seus oradores, e que premiou o *poster* seleccionado com a doação deste volume.

Este evento teve o privilégio de ter a sua Comissão de Honra presidida por Sua Excelência o Presidente da República Portuguesa, o Professor Doutor Aníbal Cavaco Silva, a qual integrou muitas outras individualidades, a nível nacional e internacional. Um reconhecimento muito especial a Sua Excelência o Ministro da Saúde, que se fez representar na Sessão de Abertura por Sua Excelência o Presidente do Instituto Nacional de Saúde Dr. Ricardo Jorge, Professor Doutor José Manuel Pereira Miguel.

Reunindo oradores de excelência, académicos, empresários, jovens cientistas e estudantes, este workshop certamente contribuiu para o estabelecimento de novas colaborações e para a transferência de conhecimentos a nível nacional e internacional, em áreas de interesse científico, económico e

social, nas quais os hidratos de carbono assumem um papel determinante. A história e a cultura portuguesa não foram esquecidas, mas um dos princi-

pais objectivos cumpridos consistiu no reconhecimento, quer do potencial do país nesta área, quer da sua contribuição para a inovação em glicociências,

em benefício da saúde humana e do bem-estar da Sociedade.

Amélia Pilar Rauter
(aprauter@fc.ul.pt)

Presidente da Comissão Organizadora



Fotografia de grupo

ITQB PHD STUDENTS' MEETING

Excelente! Foi este o comentário mais ouvido em relação ao *2nd ITQB PhD Students' Meeting*, que decorreu de 26 a 28 de Outubro de 2011 no Instituto de Tecnologia Química e Biológica da Universidade Nova de Lisboa. Organizado pelos estudantes, este encontro anual, que conta com o apoio da Sociedade Portuguesa de Química, pretende dar aos doutorandos do ITQB a oportunidade de apresentarem e discutirem os seus trabalhos, quer entre eles, quer com investigadores de referência.

À semelhança da primeira edição, o encontro esteve aberto a toda a comunidade científica e contou com a presença de 220 participantes, entre estudantes, investigadores, professores e oradores convidados. Num ambiente descontraído, o auditório do ITQB acolheu as palestras de João Paulo Crespo (FCT-UNL), Hélder Maia-to (IBMC) e Maria Carmo-Fonseca (IMM). Os oradores convidados apresentaram os seus trabalhos e partilharam a sua experiência, servindo certamente de incentivo à investigação de

excelência. A qualidade e diversidade das apresentações nas áreas de química, biologia, bioquímica e biotecnologia foram definitivamente o mote que fomentou a discussão científica.

O segundo dia do encontro terminou com a participação irreverente de Pedro Tochas. Numa sessão interactiva bastante animada, o humorista português passou, entre gargalhadas e risos da plateia, uma mensagem de motivação, valor e crença na Ciência feita em Portugal.

A realização da *round-table "The path ahead from an idea to a start-up company"* levou ao ITQB fundadores e financiadores de *start-ups*, bem como membros ligados à investigação e desenvolvimento na indústria. António Câmara (YDreams), Carlos Fontes (NZYTech), Carlos Romão (Alfama), Patrícia Calado (Bioalvo), Paulo Andrez (DNA Cascais) e William Heggie (Hovione) abordaram a criação de uma *start-up* e responderam às perguntas da plateia. As visões dos membros do painel proporcionaram

diferentes perspectivas de como alcançar o sucesso na criação de uma empresa, resultando num interessantíssimo debate.

O encontro terminou com o jantar de encerramento, durante o qual foram atribuídos os prémios para melhor apresentação em poster e melhor comunicação oral. A forte componente social do programa teve como objectivo a interacção entre os participantes, promovendo a sua aproximação. Este é um aspecto que a comissão organizadora do evento crê fundamental para a construção de sólidas colaborações científicas.

A dedicação e o entusiasmo que os alunos de doutoramento colocaram na organização deste evento estenderam-se a todos os participantes, contribuindo de forma decisiva para o seu sucesso.

Rui Ferreira e Helga Garcia

(phds@itqb.unl.pt)

Comissão Organizadora



Keynote Lecture proferida por João Paulo Crespo (FCT-UNL)



Mesa Redonda realizada com fundadores de start-ups

PORTUGUESE YOUNG CHEMISTS AWARD 2012



O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) vai atribuir o *Portuguese Young Chemists Award 2012 (PYCA 2012)*. Este prémio, agora na sua segunda edição, pretende distinguir um jovem químico pelo trabalho de investigação realizado no âmbito do seu doutoramento. Para submeter uma candidatura a este prémio, o jovem químico (com menos de 35 anos a 31 de Dezembro de 2011 e tendo obtido o grau de Doutor durante os anos civis de 2010 e 2011) deverá redigir um artigo de divulgação científica sobre a temática da sua tese, enfatizando a relevância do seu trabalho para a Sociedade em geral. O prazo de candidaturas está aberto desde **1 de Dezembro de**

2011 até 15 de Fevereiro de 2012. O vencedor verá o seu artigo de divulgação científica publicado neste Boletim e terá ainda a possibilidade de apresentar uma comunicação oral no **3rd Portuguese Young Chemists Meeting (3PYCheM)**, a decorrer de 9 a 11 de Maio de 2012 na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, onde também terá lugar a cerimónia de entrega do prémio. Todas as informações necessárias à submissão de candidaturas estão disponíveis em www.spq.pt/gqj/.

CHEMRUS – QUÍMICA ONLINE



O GQJ lança este ano a primeira edição do concurso **ChemRus – Química Online**, direccionado para alunos de Química do **Ensino Secundário**. A participação neste concurso consiste na produção de um vídeo com a exe-

cução de uma experiência de química, acompanhada de uma ficha científica. O melhor vídeo será distinguido após avaliação por um Júri a divulgar, tendo em conta a correcção científica e relevância da experiência executada, assim como a originalidade do vídeo produzido. O GQJ gostaria de convidar os **professores de química do Ensino Secundário** a participar activamente no ChemRus, incentivando os seus alunos a concorrer e orientando a componente laboratorial desta actividade. O prémio a atribuir aos alunos e à Escola Secundária do vídeo vencedor será divulgado brevemente.

O prazo para candidaturas decorre desde **1 de Dezembro de 2011 até 15 de Março de 2012**. Toda a informação necessária para concorrer, incluindo o Regulamento do concurso, está disponível em www.spq.pt/gqj/.

Vânia Calisto, Sérgio Santos
e Mariana Sardo
(Vania.calisto@ua.pt)
Grupo de Químicos Jovens



10º ANIVERSÁRIO DO PROGRAMA TRAINMiC® ASSINALADO EM FRANCA EXPANSÃO



O programa TrainMiC® de aprendizagem ao longo da vida, <http://www.trainmic.org>, desenvolvido pelo *European Commission's Joint Research Centre (JRC)*, comemora o seu 10º aniversário. Com mais de 6500 pessoas na Europa a terem recebido formação avançada em medições químicas, o programa continua em crescimento, com novas equipas de formação nacional anunciadas para a Bielorrússia, Irlanda, Lituânia e Bélgica.

É crescente o número de empregadores que exigem pessoal de laboratório qualificado para trabalhar de acordo com a principal norma internacional usada por laboratórios de ensaio e calibração, ISO/IEC 17025. Exemplo disso é o facto de a Federação Europeia

das Indústrias Químicas (CEFIC) e o Grupo de Alto Nível sobre a Competitividade da Indústria Química, da UE, terem identificado o ensino e a formação como uma iniciativa estratégica.

Reconhecendo um défice de competências em metrologia química (a ciência das medições), o *JRC's Institute for Reference Materials and Measurements (JRC-IRMM)*, <http://irmm.jrc.ec.europa.eu>, pôs em prática uma colaboração entre especialistas para desenvolver um programa harmonizado e especializado de formação de pessoal de laboratório.

O programa que daí resultou é implementado em quase 20 países, por mais de 80 formadores reconhecidos

pela Comissão Europeia – cada um dos quais assinou um acordo, *JRC User License Agreement*, de utilização do conteúdo do curso TrainMiC®. Actualmente, o programa TrainMiC® está disponível em catorze línguas, e mais duas (russo e francês) serão brevemente adicionadas à lista.

Dotar as pessoas com as competências adequadas para as tarefas do presente e do futuro é um elemento chave das iniciativas emblemáticas da Comissão Europeia, nomeadamente “Agenda de novas competências e profissões” e “Juventude em Movimento”.

Recentemente, o Director do JRC-IRMM, Krzysztof Maruszewski, comentou: “A Europa precisa de técni-

cos de laboratório altamente qualificados e treinados nas melhores práticas dos laboratórios de ensaios actuais. O programa TrainMiC® é uma história europeia de sucesso que ajudou mais de 6500 pessoas – muitas das quais jovens investigadores – a adquirir essas competências”.

Em Portugal, a equipa TrainMiC®-PT, <http://www.trainmic.fc.ul.pt>, composta por M. Filomena Camões, Cristina Oliveira e Ricardo B. da Silva (DQB-FCUL), Maria Ascensão Trancoso e Paula Teixeira (LNEG), Alice Mosca (A.I.M., Consultadoria, Formação, Auditoria) e Florbela Dias (IPQ) foi constituída em 2006, coordenada, à data, por M. Filomena Camões, e actualmente por Cristina R. Oliveira, investigadoras do CCMM-DQB, FCUL, tendo promovido 7 acções TrainMiC®-PT, com cerca de 130 formandos, das mais diversas instituições, tanto estatais como privadas, do Norte ao Sul de Portugal Continental e Insular.

A equipa portuguesa participou na Convenção que celebrou o 10º aniversário do programa TrainMiC®, que decorreu em Alden Biesen, Hasselt, na Bélgica, de 9 a 12 de Outubro e onde lhe foi atribuído o prémio “Challenge Cup” devido à qualidade e originalidade dos conteúdos de formação em metrologia química propostos.

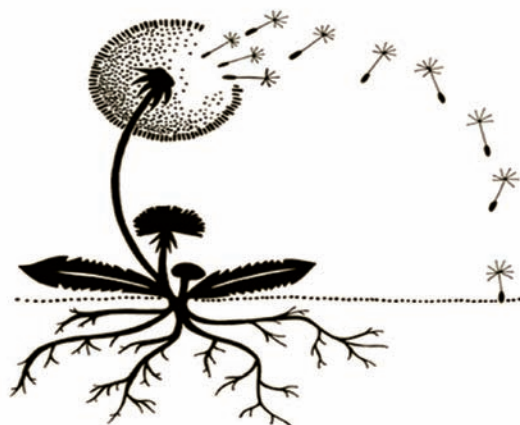
Cristina Oliveira

(cmoliveira@fc.ul.pt)

Coordenadora Nacional do Programa TrainMiC®



Imagens da convenção que celebrou o 10º aniversário do programa TrainMiC®



2001-2011

a steadily expanding learning community



Postal do futuro do programa TrainMiC®

ASSEMBLEIA GERAL DA EUChEMS – BELGRADO, 13-14 OUTUBRO 2011



A Assembleia Geral (AG) da EuChEMS (European Association for Chemical and Molecular Sciences) reúne representantes das sociedades constituintes, geralmente através dos presidentes ou vice-presidentes, os coordenadores das divisões (D) e grupos de trabalho (WP), a direcção da EuChEMS e convidados.

Na primeira parte da reunião, os coordenadores das divisões e WPs resumiram as actividades do ano anterior

e apresentaram as propostas para 2012. Dum modo geral, as actividades envolvem a organização de conferências, no âmbito da EuChEMS ou em colaboração com outras associações, publicação de textos de natureza científica ou pedagógica, estando os planos para 2012 muito focados na organização do 4th EuChEMS Chemistry Congress (Praga, 26-30 Agosto), em que quase todas participam activamente. Foi referido o interesse de ter representantes do maior número possível de países nestes WPs e Ds, incluindo investigadores jovens.

Na AG foram discutidos vários assuntos, com maior relevo para os seguintes:

1. Estratégia e política da EuChEMS (apresentadas pelo presidente cesaante, Luis Oro, e pelo novo presidente Ulrich Schubert).

A EuChEMS tem por objectivo ser uma voz única para as ciências químicas e moleculares na Europa, apresentando a química como uma proponente essencial e indispensável de soluções para os desafios

globais. Para atingir os objectivos estratégicos de 2009-2013, propõe-se actuar a vários níveis:

- Fortalecer a base científica
- Concretizar a política de desenvolvimento
- Encorajar o desenvolvimento profissional e as redes
- Promover parcerias efectivas
- Aumentar a comunicação e reconhecimento
- Melhorar a tomada de decisões na governação e finanças

2. Informações diversas:

- A Química e o European Research Council (descrição dos programas de bolsas, possibilidades na área e dados sobre o sucesso)
- Os congressos da EuCheMS (2012, Praga; 2014, Istambul; 2016, Espanha). No congresso de Praga foram estabelecidos preços de 400€ (membros de sociedades da EuCheMS), 220€ (estudantes membros de sociedades da EuCheMS) e 600€ (não sócios)
- Colaborações com a Federação das Sociedades Químicas da Ásia (FACS), American Chemical Society (ACS), European Chemistry Thematic Network Association (ECTN – sucesso das creditações Eurobachelor, Euomaster, Eurodoctor), FECCIA (Federação Europeia dos Empresários na Química e Indústria Química – o problema do envelhecimento da mão de obra), European Federation for Medicinal Chemistry (próxima conferência Lisboa, 2014), CE-

FIC (o projecto Europe 2020)

- Criação dum novo WP em Ciência e Ética (quem estiver interessado pode contactar a SPQ)
- Foram entregues os EuCheMS Awards aos recipientes de 2011 e foi anunciado que o Award relativo a 2012 tinha sido atribuído a **José Empis**, da **Sociedade Portuguesa de Química**, que entre muitas outras actividades foi um dinamizador do WP e da Divisão de Química Alimentar em Portugal e na EuCheMS, e foi o primeiro tesoureiro da EuCheMS. A SPQ congratula-se com esta decisão e felicita o Prof. José Empis

3. Grupos de discussão

Existe um período da AG destinado a discutir assuntos de interesse geral, sendo depois apresentadas as conclusões.

A – *European Research Council* (fui convidada para coordenar, com Michele Aresta, este grupo). O sucesso na área da química é semelhante (ou levemente maior) ao das outras (~15%), mas depende muito do país. Das duas áreas possíveis (PE4 Physical & Analytical Chemical sciences; PE5 Materials & Synthesis), foram submetidas 26 propostas por grupos portugueses em PE4 e 26 em PE5 (2001-2011) e nenhuma foi aprovada.

B – *Horizons 2020*. Foi publicado um texto (Chemistry-Developing solutions in a changing world) destinado a realçar o papel central da Química na resolução dos desafios que se põem neste

mundo em mudança. O exemplar em papel distribuído encontra-se na sede da SPQ (foi anteriormente enviado por correio electrónico a todos os sócios). Neste grupo debateram-se estas questões – *Roadmaps*.

C – *Core activities*. Como definir produtos que sejam “vendáveis” e ajudem a diversificar fontes de financiamento?

D – *Open Access journals*. Este é um tópico muito importante. É um novo tipo de negócio na publicação de resultados científicos. No entanto, parte significativa das sociedades científicas sobrevive devido à publicação de revistas de reconhecida qualidade (a SPQ participa no consórcio ChemPubSoc Europe). Nas revistas Open Access quem paga é o autor e o acesso é grátis para os leitores. O autor pode dispôr do artigo (página pessoal, por exemplo). Dada a dimensão que já alcança, as próprias sociedades estão a criar soluções alternativas (pagar uma quantia que dá o acesso livre a um dado artigo), embora sem grande expressão. Que acontecerá a longo prazo à qualidade das publicações? O financiamento da investigação vai ser usado directamente para pagar a publicação?

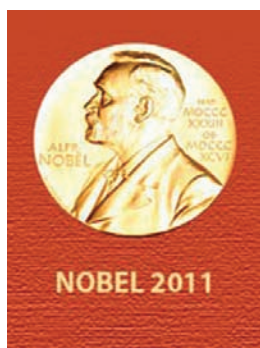
A AG admitiu escrever um texto chamando a atenção para estas preocupações.

Maria José Calhorda

(mjc@fc.ul.pt)

Vice-Presidente da SPQ

PRÉMIO NOBEL DA QUÍMICA 2011: ATRIBUÍDO PELA DESCOBERTA DOS QUASE-CRISTAIS



O Prémio Nobel da Química 2011 foi atribuído a **Dan Shechtman** (Technion – Israel Institute of Technology, Haifa, Israel), pela descoberta que os átomos nos quase-cristais (*quasicristais*) apresentam um padrão regular que nunca se repete. Nos quase-cristais conseguimos encontrar o arranjo fascinante dos mosaicos Árabes reproduzido ao nível de átomos: padrões regulares que não se repetem!

Com esta descoberta, Dan Shechtman, nascido em 1941 em Tel Aviv, Israel, contrariou a ciência até então estabelecida, pois esta configuração era considerada impossível, e alterou de forma fundamental a maneira como os químicos entendem a matéria sólida.

Na manhã de 8 de Abril de 1982, apareceu no microscópio electrónico

de Dan Shechtman uma imagem que contrariava as consideradas “leis da natureza”. Em toda a matéria sólida, acreditava-se que os átomos eram acondicionados em cristais com padrões simétricos que se repetiam periodicamente, vezes sem fim. Para os cientistas, esta repetição era necessária para se obter um cristal. Até há altura, acreditava-se que podia haver simetria rotacional de 2, 3, 4 ou 6 eixos, mas alguns tipos de simetria com 5, 7 ou mais eixos não eram viáveis (Figura 1).

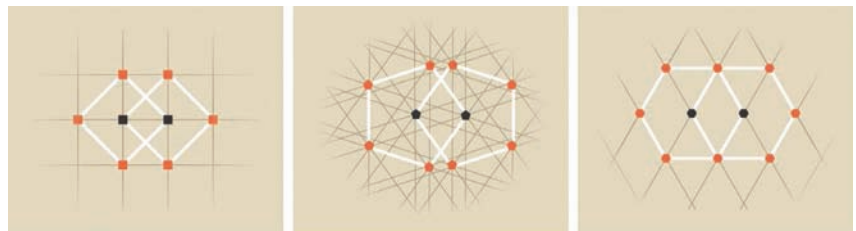


Figura 1 – Simetrias rotacionais de 4-eixos (esquerda) ou de 6-eixos (direita) geram novos eixos de rotação à mesma distância de separação, como no par original, logo, a sua repetição gera periodicidade. No caso de simetria de 5-eixos (centro), gera-se uma nova distância, mais curta, resultando em não-periodicidade

A imagem de Shechtman mostrava contudo que os átomos naquele cristal dispunham-se com um padrão que não se repetia. Este padrão era considerado tão impossível quanto criar uma bola de futebol apenas com polígonos hexagonais, quando uma esfera necessita de polímeros quer com 6, quer com 5 lados. O material sólido, obtido por síntese, e composto por alumínio e magnésio, assemelhava-se ao nível molecular a mosaicos árabes, uma vez que obedecem a regras matemáticas sem contudo repetirem padrões (Figuras 2 e 3).

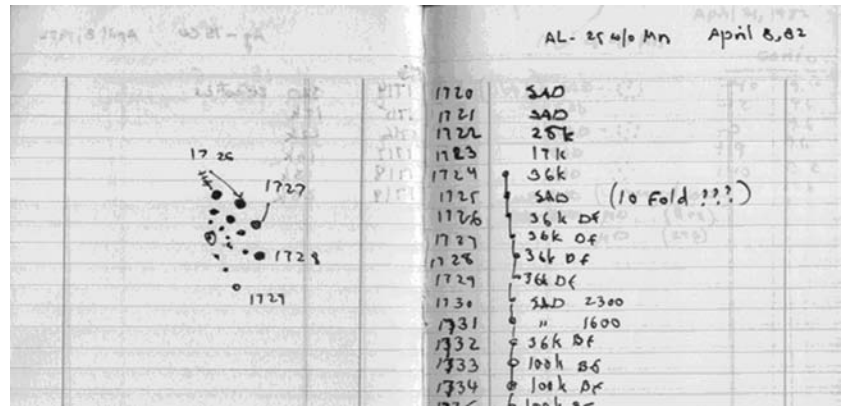


Figura 2 – Anotações de Dan Shechtman relativas à descoberta dos quase-cristais no dia 8 de Abril de 1982. Note-se a escrita de “10 Fold !!!” (www.quasi.iastate.edu/discovery.html)

A sua descoberta foi extremamente controversa, levando mesmo a um pedido para que Shechtman se retirasse do seu grupo de investigação. No entanto, a sua batalha eventualmente forçou os cientistas a reconsiderar a sua concepção sobre a própria natureza da matéria. Em 1992, depois da descoberta de Shechtman ser comprovada e reconhecida oficialmente, a União Internacional de Cristalografia alterou a definição do termo “cristal” para englobar também os quase-cristais. Actualmente, esta definição não faz qualquer tentativa de definir directamente o conceito de cristal, fornecendo antes uma definição operativa baseada no padrão de difracção do material: “por cristal considera-se qualquer sólido que tenha um diagrama de difracção essencialmente discreto”. Esta definição deixa espaço para estruturas ainda desconhecidas, num sinal de humildade face a descobertas futuras.

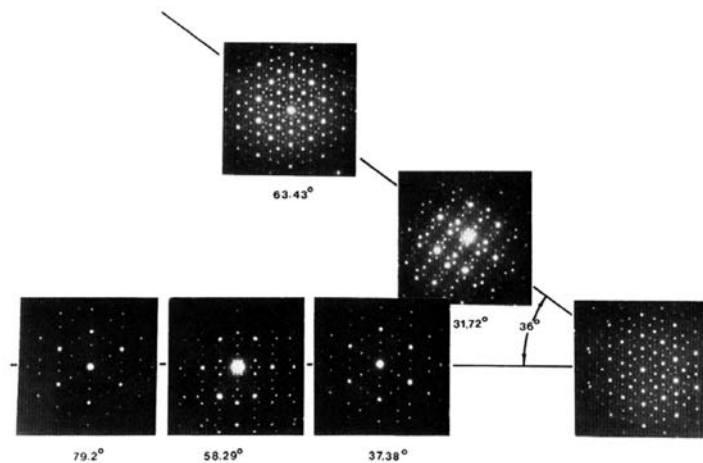


Figura 3 – Imagens originais visualizadas ao microscópio electrónico por Dan Shechtman

O feito conseguido por Dan Shechtman não foi apenas a descoberta dos quase-cristais, mas também a consciência da importância dos seus resul-



Professor Dan Shechtman no Technion – Israel Institute of Technology, Israel (Fonte: “Photo Gallery”. Nobelprize.org. 7 Nov 2011)

tados, bem como a sua determinação em comunicar os mesmos face ao cepticismo da comunidade científica. (Fonte: "The Nobel Prize in Chemistry

2011 – Press release" e "The Nobel Prize in Chemistry 2011 –Scientific background", Nobelprize.org, 7 Nov 2011, Real Academia Sueca de Ciências)

Joana Amaral
(bquimica@ipb.pt)
www.spq.pt

FERNANDO MANUEL RAMÔA CARDOSO RIBEIRO (FUNCHAL, 04/10/1945 - LISBOA, 29/08/2011)

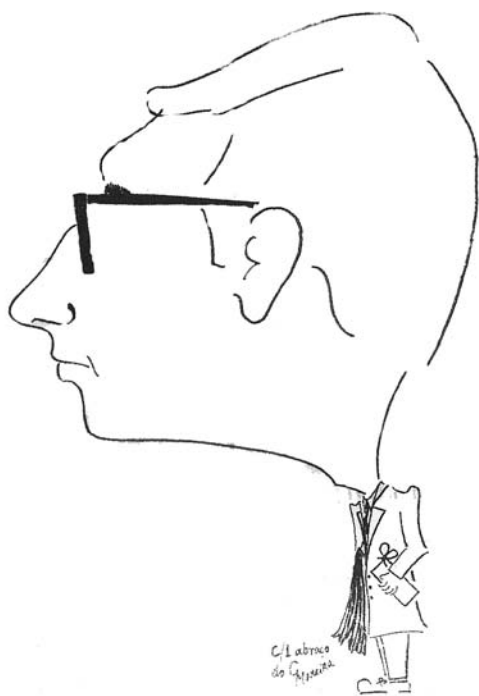
Conheci o Ramôa em 1962, quando ambos ingressámos na Licenciatura em Engenharia Químico-Industrial na Universidade do Porto. Passados 6 anos, estávamos entre a meia dúzia de colegas que tinha completado o curso sem perder qualquer ano. As palavras que o nosso colega Rui Pinto lhe dedicou para o livro do 5º ano de curso descrevem bem o estudante Ramôa: "*Sempre nas aulas atento/ Tirando seu apontamento/ Não deixando nada à toa/ o meu colega Ramôa/ vai fazendo suas cadeiras/ sem fazer quaisquer asneiras/ Nos estudos ele é "urso"/ E, sendo o benjamim do curso/ Auguro-lhe grande sucesso/ No caminho do progresso.*" Desse tempo passado na Invicta ficou-lhe para sempre a paixão pelo Futebol Clube do Porto. Iniciámos então carreiras paralelas: o Ramôa entrou como assistente na Universidade de Coimbra, e eu fiquei na FEUP. Quando em 1975 regressei de Londres, onde me doutorei num

tema de Catálise Heterogénea, vim encontrar o Ramôa no Instituto Superior Técnico, integrado num grupo de investigação da mesma área. Entretanto, ele tinha cumprido o serviço militar obrigatório, tendo sido destacado para o Instituto Hidrográfico da Marinha, uma posição muito pretendida pelos Engenheiros Químicos (pois assim se evitava a ida para a guerra colonial), mas que só estava ao alcance dos Licenciados com as melhores classificações. Ele também ambicionava fazer o Doutoramento no estrangeiro (na nossa área, e naquela altura, era impossível fazê-lo no País), mas o director do grupo não se mostrava muito entusiasmado com a ideia. Foi preciso apresentar-lhe o facto consumado, nomeadamente um convite irrecusável do Instituto Francês do Petróleo (IFP), que o Ramôa conseguiu obter do Doutor Roger Montarnal durante o 5º Simpósio Ibero-Americano de Catálise, que decorreu em Lisboa em 1976.

Universidade de Poitiers, sendo seu patrono o Professor Michel Guisnet, com o qual viria a manter uma estreita colaboração durante toda a vida. Quando regressou ao IST criou o seu próprio grupo de investigação sobre Catálise por Zeólitos, que rapidamente se transformou numa referência, não só a nível nacional, mas também a nível europeu, sobretudo devido às colaborações intensas que manteve com cientistas de renome, nomeadamente Michel Guisnet (Poitiers), Eric Derouane (Namur; Liverpool; Faro), Jacques Védrine (Liverpool; Paris) e Michel Che (Paris). Aliás, uma das características do seu grupo era que todos os seus colaboradores e doutorandos tinham necessariamente que desenvolver uma parte mais ou menos extensa do seu trabalho no estrangeiro (em particular no grupo de Michel Guisnet, na Universidade de Poitiers). Esta intensa e profícua colaboração, e o seu contributo para o desenvolvimento das relações bilaterais com as instituições científicas e Universidades da França, mereceram o reconhecimento do Governo Francês, que lhe atribuiu várias condecorações, entre as quais a Ordem de *Chevalier de la Légion d'Honneur*.

Tive oportunidade de acompanhar muito de perto toda a carreira académica do Ramôa após o Doutoramento, pois estive presente em quase todos os seus júris: Equiparação de Doutoramento (1980); Concurso para Professor Associado (1985); e Provas de Agregação, em que fui arguente (1988).

Em 1981 o Ramôa participou, creio que pela primeira vez, num Curso Avançado NATO (*Advanced Study Institute on Catalyst Deactivation*, Lagos, Algarve). Tendo apreciado o formato, e reconhecendo-lhe o potencial para fomentar a internacionalização do seu grupo de investigação, logo



FRR em 1967 visto pelo colega Fernando Moreira

A sua tese de Doutoramento, realizada no IFP de 1977 a 1980 sob orientação do Professor Christian Marcilly, em colaboração com a Universidade de Poitiers, versou sobre a preparação e propriedades catalíticas da platina suportada em zeólitos. Este trabalho, em particular a técnica de permuta iónica com competição desenvolvida para preparar catalisadores metálicos suportados [cf. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, vol. XXXIV, 1979, 405-428], constitui um exemplo notável da aplicação de princípios científicos à preparação de catalisadores, que era então mais uma arte do que uma ciência. Em 22 de Março de 1980 obteve o Doutoramento pela

decidiu organizar também um curso sobre Zeólitos (Alcabideche, 1983), a que mais tarde se seguiu uma série de 5 ASIs, organizados em colaboração com Francisco Lemos e Eric Derouane, entre 1991 e 2005. De cada um destes cursos foi editado um livro, publicado na NATO ASI Series (*Zeolites – Science and Technology*, 1984; *Zeolite Microporous Solids: Synthesis, Structure and Reactivity*, 1992; *Catalytic Activation and Functionalisation of Light Alkanes – Advances and Challenges*, 1998; *Combinatorial Catalysis and High Throughput Catalyst Design and Testing*, 2000; *Principles and Methods for Accelerated Catalyst Design and Testing*, 2002; *Sustainable Strategies for the Upgrading of Natural Gas: Fundamentals, Challenges and Opportunities*, 2005). A relevância dos temas, e o carácter didáctico da sua abordagem, fazem destas obras um valioso auxiliar para o ensino avançado da Catálise e da Engenharia das Reacções Catalíticas.

Entre 1982 e 1987 colaborámos intensamente no Curso de Mestrado em Química dos Processos Catalíticos, uma iniciativa pioneira do Centro de Química Estrutural do IST (e em particular do Alberto Romão Dias). A grande maioria dos colaboradores mais graduados do Grupo de Zeólitos fez a sua aprendizagem da Catálise nesse curso. Foi nesse período que surgiu a ideia de escrevermos um livro de texto sobre Catálise Heterogénea, que pudesse servir de apoio aos nossos alunos, respectivamente na FEUP e no IST. A obra viria a ser publicada pela Fundação Calouste Gulbenkian em Janeiro de 1989, e foi usada desde então por várias gerações de estudantes de Engenharia Química em diversas Universidades e Politécnicos do País, e também do Brasil, onde o livro teve grande divulgação e sucesso. Este foi o primeiro de uma série de textos didácticos que o Ramôa escreveu, entre os quais destaco: “Zeólitos: Um Nanomundo ao Serviço da Catálise” (com Michel Guisnet, em 2004); “Catálise Heterogénea”, 2ª edição revista e actualizada (com J.L. Figueiredo, em 2007); e “Desactivação e Regeneração de Catalisadores” (com Michel Guisnet, Henrique Cerqueira e J.L. Figueiredo, em 2008), todos publicados pela Gulbenkian.



Imposição de insígnias FEUP 1968, com os colegas de curso (1ª fila, segundo a contar da direita)

Em paralelo com esta intensa actividade de ensino e de investigação, o Ramôa dedicou-se também à gestão científica e universitária. Foi Vice-Presidente do Conselho Directivo do IST (entre 1984 e 1988), Vice-Reitor da Universidade Técnica de Lisboa (de 1999 a 2002), e era Reitor desde 2007, cargo que exercia quando faleceu (tinha sido eleito para um segundo mandato em Fevereiro do corrente ano). Esteve na Junta Nacional de Investigação Científica e Tecnológica, primeiro como Vice-Presidente (1989-1994) e depois como Presidente (1994-1997), e foi Presidente da Fundação para a Ciência e a Tecnologia de 2002 a 2005. Foi ainda membro do Conselho Científico da NATO (1989-1997), membro do Conselho de Governadores do Joint Research Center da União Europeia (1989-1996), do Conselho Consultivo da European Science Foundation, e do Conselho do EUROHORCS.

O desempenho destes cargos proporcionou-lhe amplas oportunidades para contribuir para o fortalecimento da comunidade científica, em particular nas áreas da Catálise e da Engenharia Química. A nível europeu, destaca-se a sua intervenção decisiva para a criação da ERA-Net “ACENET”, envolvendo as entidades financiadoras da investigação de 10 países (2004-2010), com o objectivo de fomentar a cooperação internacional na investigação em Catálise Aplicada. A nível nacional, cumpre referir a colaboração e apoio ao Curso Integrado de Catálise, organizado pela Sociedade Portuguesa de Química e pelo Depar-

tamento de Química da Universidade de Coimbra, que decorreu entre Abril e Junho de 2006. Este Curso, baseado num formato definido pela ACENET, foi leccionado por especialistas nacionais e estrangeiros da Universidade e da Indústria (Hovione, GALP, QUIMIGAL, CIRES), e nele participaram 50 estudantes das Universidades de Coimbra, Porto, Aveiro, Évora, UNL e IST.

Deu importante colaboração às associações profissionais e científicas, nomeadamente à Ordem dos Engenheiros (Colégio de Engenharia Química) e à Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Em particular, no que se refere à SPQ, devo referir a participação do Ramôa nas actividades da Divisão de Catálise e Materiais Porosos (DCMP), que apoiou desde a sua criação e que representou em diversos organismos internacionais: Conselho Científico da Federação Europeia das Sociedades de Catálise (EFCATS) desde 2001, tendo sido Vice-Presidente da mesma de 2001 a 2005; International Catalysis Council (ICC), e Federação Ibero-Americana das Sociedades de Catálise (FISOCAT).

Durante os 12 anos que passou ao leme da JNICT/FCT tentou assegurar a estabilidade dos financiamentos ao sistema científico nacional, estimulando investigadores e Unidades de Investigação na procura da excelência, e contribuindo decisivamente para a sua afirmação no panorama internacional. Foi também um grande impulsionador das colaborações entre a Universidade e a Indústria, tendo

criado as Bolsas de Doutoramento em Empresas.

O Ramôa era uma pessoa assertiva, não alimentava conflitos, e tinha um excelente relacionamento com estudantes, colegas, e funcionários. Era conhecido o interesse com que acompanhava e promovia as carreiras profissionais dos seus alunos. Era naturalmente um *charmeur*, e facilmente encantava todos os que com ele privavam. Dedicou toda a sua vida ao Ensino, à Ciência e à Universidade, que colocou sempre em primeiro lugar, mesmo em detrimento da sua vida pessoal. Soube rodear-se dos melhores colaboradores, fomentando o trabalho de equipa, o que lhe permitiu manter-se simultaneamente activo nas três vertentes da actividade universitária: ensino, investigação e gestão. Deixa uma vasta obra científica (12 livros e mais de 200 trabalhos publicados em revistas da especialidade), que continuará certamente a ser, por muitos anos, uma importante referência na sua área.

Numa entrevista televisiva recente (SIC Notícias, 24 de Fevereiro de



Com os colegas de curso Alírio Rodrigues e José Figueiredo no Ministério da Ciência, Dezembro de 2004

2011), o Ramôa afirmava que tinha concretizado o sonho da sua vida. Referia-se ao Programa de Doutoramento em Engenharia da Refinação, Petroquímica e Química (EngIQ), um programa doutoral inovador envolvendo a colaboração de várias Universidades com empresas daquele sector industrial, de que foi um dos principais mentores. Ele teria certamente outros sonhos, que poderia vir a concretizar se a sua vida não tivesse sido inter-

rompida prematuramente. A Universidade Portuguesa perdeu um dos seus maiores expoentes; e eu perdi um dos meus melhores amigos.

O Ramôa partiu. Mas permanecerá para sempre no coração de todos os que com ele conviveram.

José Luís Figueiredo (jlfig@fe.up.pt)
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto



ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

FÁRMACOS SOB A FORMA DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Actualmente, os líquidos iónicos são considerados como uma alternativa mais segura e mais adequada em termos ambientais, quando comparados a solventes orgânicos, geralmente voláteis e inflamáveis.

Os líquidos iónicos são constituídos por um par de espécies, sendo uma catiónica e a outra aniónica, cuja energia de cristalização não permite a formação de um sólido à temperatura ambiente, fazendo com que permaneçam no estado líquido.

Esta propriedade foi recentemente aplicada à tecnologia farmacêutica, em que

um composto iónico farmacologicamente activo é emparelhado com uma base biocompatível de forma a originar uma formulação líquida mais estável que o composto iónico original.

O fármaco sob a forma de líquido iónico é passível de administração transdérmica e significa um passo importante na eliminação de formas polimórficas pouco activas que podem estar presentes em fármacos sólidos com estrutura cristalina, mas não sob a forma de líquido iónico.

Mais detalhes podem ser consultados em:

<http://www.rsc.org/chemistryworld/News/2011/September/22091102.asp>.

(adaptado de http://www.chemweb.com/content/alchemist/alchemist_20110928.html)

Marcela Segundo
(msegundo@ff.up.pt)
Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto

UM ANO DE QUÍMICA – O ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA

JOAQUIM LUÍS DE FARIA*

O ano de 2011 está a chegar ao fim e por isso aproxima-se o termo das celebrações oficiais do Ano Internacional da Química. Um olhar rápido pela página internacional (chemistry2011.org) mostra que se tratou de um evento verdadeiramente global, o que tendo em conta a actual conjuntura mundial não deixa de ser animador: afinal pode ser que haja mais que nos una, do que nos separe. Os números e os factos, serão só por si impressionantes, mas na realidade não fazem justiça ao que realmente se passou. É impossível contabilizar quantos foram realmente tocados pelo espírito entusiástico, dos milhares de emissários da química que fizeram dos objectivos do AIQ a sua bandeira. Seria interessante ter uma medida de quantos foram os jovens que conseguimos estimular para uma carreira em química! De quantas pessoas pusemos a pensar sobre a importância da química no seu dia-a-dia! Se o papel da mulher na química, e na ciência, foi devidamente realçado!

Em Portugal, foi verdadeiramente espantoso observar o entusiasmo com que todos os representantes dos departamentos de química, engenharia química, bioquímica, farmácia e ramos afins, se comprometeram com os objectivos do AIQ, numa reunião sem precedentes, levada a cabo em Coimbra, em Novembro de 2010, precisamente há um ano atrás. Das muitas ideias apresentadas, nem todas vingaram, não pela sua natureza, mas na maior parte dos casos porque simplesmente não foi possível fazer mais. Basta olhar para o diário do AIQ, publicado nas páginas deste boletim (e dos precedentes), para ter uma ideia do esforço empenhado de todos

os actores neste grande palco nacional. Apesar de tudo, de certeza que se poderia ter feito mais e melhor, mas a química não se esgota no AIQ e agora que conhecemos melhor as nossas potencialidades, só há que aproveitar os caminhos abertos e prosseguir nos anos que se seguem.

O papel da SPQ foi sobretudo o de dar visibilidade e expressão às inúmeras actividades que nos iam sendo comunicadas; mesmo às muitas outras que não eram, mas que diariamente procurávamos descobrir. No calendário da nossa página www.spq.pt/quimica2011, poucos são os dias do ano que não têm um círculo azul a cheio. Editámos livros, uma versão actualizada da Tabela Periódica e outros materiais didácticos; promovemos concursos; organizámos olimpíadas; traduzimos materiais; disponibilizamos recursos; produzimos pins, autocollantes e posters; apoiamos conferências, oficinas de química, exposições e espectáculos; ampliamos a nossa carteira de conferências; colaborámos com câmaras municipais, autarquias, escolas e instituições; estivemos na televisão e na rádio; fomos à Assembleia da República; colaborámos em acções colectivas internacionais, como A Experiência Global da Água; e mais importante que tudo isso, estivemos sempre que possível, do lado de todos os que sendo ou não nossos associados, nos pediram apoio para as suas actividades.

Seria injusto referir este ou aquele evento, em detrimento de todos os outros, mas só para sublinhar o espírito de cooperação e empenho, gostaria de realçar as Noites da Química que tiveram lugar de Setembro a Outubro

nas cidades de Coimbra, Porto, Bragança, Covilhã, Funchal, Braga, Vila Real, Lisboa e Évora, organizadas pelos docentes e investigadores dos departamentos das respectivas universidades. Que me perdoem todos os outros, mas também gostaria de referir um espectáculo que me ficou na memória, sobretudo pelo entusiasmo e juventude: a peça "O Grande Musical da Química" (baseado no livro Breve História da Química, de Regina Gouveia, co-editado pela SPQ e dedicado a um público infanto-juvenil) e que foi levada à cena no Teatro Rivoli do Porto, por dezenas de jovens estudantes do 10º ao 12º ano, deliciosamente amadores, mas ao mesmo tempo com um espírito profissional impressionante, estreada no dia 20 de Junho, véspera de exame nacional para muitos dos intervenientes!

Agora que o ano chega ao fim e que todos se preparam para o encerramento do AIQ, não deixa de ser curioso e agradável referir que a SPQ se prepara para festejar os seus 100 anos, feitos em Dezembro. A festa já começou em Braga com o Congresso do Centenário "100 Anos de Química em Portugal", organizado de forma soberba pelo João Paulo André e pela sua equipa. Foi um dos encontros nacionais mais concorridos de sempre, o que é um bom prenúncio para o que temos planeado para 2012 – assim tenhamos os meios para o concretizar...

Desta forma não me ocorre melhor maneira para terminar, do que aquela com que iniciei estas linhas: é muito mais o que nos une do que aquilo que nos separa.

Festas Felizes e Bom Ano de 2012!

* Secretário Geral da SPQ
E-mail: jlfaria@fe.up.pt

O Diário publicado neste número do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química compila o conjunto de actividades realizadas no âmbito do Ano Internacional da Química e do Centenário da SPQ durante os meses de Agosto, Setembro e Outubro de 2011.

AGOSTO

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

Exposição “Química em Flash” – No âmbito das comemorações do Ano Internacional da Química, a Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro e o Departamento de Química da Universidade de Aveiro promoveram “Química em flash”, um concurso de fotografia científica. Este desafio teve como objectivo motivar e sensibilizar o público escolar e geral para a Química que existe à nossa volta, incentivando a criatividade e imaginação aliadas a esta área científica. Os melhores trabalhos do concurso “Química em Flash” estiveram em exposição na Reitoria da Universidade durante o mês de Agosto.

LIVROS E PUBLICAÇÕES:

Newsletters mensal SPQ e quinzenal AIQ

SETEMBRO

LIVROS E PUBLICAÇÕES:

Boletim SPQ – Química 122

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

A Química na Festa do Avante – A convite da organização, a SPQ participou, de forma estritamente científica, na Festa do Avante (Seixal, 2-4 de Setembro), cujo pavilhão de ciência foi este ano dedicado à Química. Na zona de demonstrações interactivas estiveram presentes o Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNL (João Carlos Lima, João Sotomayor, entre outros), com experiências dedicadas à Fotoquímica, Polímeros e Gastronomia Molecular, para além de outros temas. Foram ainda proferidas as palestras “A História Química de uma Vela de Michael Faraday” (Sérgio Rodrigues e Filipa Oliveira, FCT-UC) e “Viva a

Química” (ITQB-UNL, Carlos Romão). Houve ainda uma sessão sobre o Ano Internacional da Química e o Centenário da SPQ, com a presença do Prof. Rui Namorado Rosa (UE) e do Presidente da SPQ (Mário Nuno Berberan e Santos). Para além das iniciativas em que a SPQ colaborou, incluindo (como consultora) uma excelente exposição em painéis ilustrados sobre a Química nos seus variados aspectos, que poderá ser requisitada por escolas interessadas, falou-se da “Química no Universo” (Máximo Ferreira e Ana Maria Dias) e o Núcleo de Estudantes de Física do IST também apresentou várias demonstrações relacionadas com Química. A iniciativa foi sempre muito participada, tendo passado pelo pavilhão vários milhares de pessoas.

CONGRESSOS:

III Jornadas Ibéricas de Fotoquímica

Data: 4 a 7 de Setembro

Local: Universidade de Granada, Espanha

5th Iberian Carbohydrate Meeting – GLUPOR 9

Data: 4 a 7 de Setembro

Local: Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, Vila Real

ACÇÕES DE FORMAÇÃO / WORKSHOPS:

Actividades Laboratoriais para o 12º Ano

Data: 5 a 10 de Setembro

Local: Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

Tópicos de Química Física para Compreensão do Mundo Actual

Data: 7 de Setembro a 6 de Outubro

Local: Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

CONGRESSOS:

Glycosciences in the International Year of Chemistry: Applications to Human Health and Disease

Data: 8 a 10 Setembro



1



2



3



4

1, 3 e 4 – Pavilhão da química na Festa do Avante; 2 – Sessão sobre o AIQ 2011 e o Centenário da SPQ

Local: Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa

Encontro da rede SUPRAPHONE – SUPRAMOLECULAR PHOTONICS NETWORK IN EUROPE

O Centro de Química da Madeira da Universidade da Madeira organizou, de 7 a 10 de Setembro, a conferência anual da rede europeia SUPRAPHONE - Supramolecular Photonics Network in Europe. A conferência teve lugar no Hotel CS Madeira e contou com a participação de vários oradores convidados, entre os quais os Professores Xiangyang Shi, titular da Cátedra Santander em Nanotecnologias na Universidade da Madeira, Carsten Schmuck, da Universidade de Duisburg-Essen, na Alemanha, e Makoto Fujita, da Universidade de Tóquio, no Japão.



Encontro da Rede SUPRAPHONE

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

Exposição VIDA E OBRA DE MARIA SKŁODOWSKA-CURIE (1867-1934)

De 9 de Setembro a 9 de Outubro, o Centro Comercial Dolce Vita Douro, em Vila Real, recebeu a exposição sobre a vida e obra desta investigadora, a primeira mulher a conquistar um Prémio Nobel. A exposição foi organizada em colaboração com os Arquivos da Academia das Ciências da Polónia e o Museu de Maria Skłodowska Curie, em Varsóvia. A versão portuguesa foi da autoria da Comissão para o AIQ do Departamento de Química da Universidade do Minho. De 10 de Outubro a 8 de Novembro esta exposição esteve também disponível no Átrio da Química da Reitoria da Universidade do Porto.



Maria Skłodowska Curie

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

GOLDEN CHEMISTRY

O ciclo de conferências GOLDEN CHEMISTRY levou, à Universidade da Madeira, uma série de personalidades ligadas à Química.

“**Networking molecular cages and capsules**” – Prof. Makoto Fujita, Universidade de Tóquio, Japão – 12 de Setembro

“**Multicomponent transition metal complexes: from charge separation to light-driven molecular machines**” – Prof. Jean-Pierre Sauvage, Northwestern University, EUA – 13 de Outubro

PRODUTOS AUDIOVISUAIS:



Fábrica: Ciência a Brincar

“Fábrica, Ciência a Brincar” é um magazine de divulgação científica dedicado ao público mais jovem, com emissão na SIC K e produzido pela Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro. Este programa surge como resultado de uma parceria que a Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro e a Universidade de Aveiro iniciaram com a SIC. O projecto contempla já duas séries de episódios e visto estarmos no Ano Internacional da Química, alguns abordaram conceitos de química. A primeira série, de 10 episódios, estreou no dia 13 de Setembro. A segunda série, de 12 episódios, estreou a 11 de Outubro.

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

Light-induced water splitting and hydrogen production in nature – Wolfgang Lubitz, Max Planck Institute of Bioinorganic Chemistry – Mülheim an der Ruhr, Germany 15 de Setembro, Biblioteca da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa



Noite da Química no Porto

CONGRESSOS:

III Simpósio Internacional de AMONET

Data: 17 e 18 de Setembro

Local: Fundação Calouste Gulbenkian

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

“**Mare nostrum: lessons in chemical diversity**” – Ana Lobo, REQUIMTE- FCT/UNL-Caparica, Portugal 21 de Setembro, Biblioteca da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:



Noite da Química :: Porto e Bragança

A Noite da Química, um evento realizado no âmbito do Ano Internacional da Química, ocorreu em simultâneo nas cidades do Porto e de Bragança a partir do final de tarde do dia 23 de Setembro. Esta foi uma noite diferente em que todos, de todas as idades, puderam apreciar ao vivo a beleza da química em todas as suas vertentes. O programa constava de actividades de demonstração e experiências realizadas ao vivo, actuações de tunas, fóruns de discussão, poesia, e muito mais. No Porto, três Faculdades da Universidade do Porto (Faculdade de Engenharia, Faculdade de Ciências e Faculdade de Farmácia) que promovem o ensino da química juntaram-se no Átrio da Química da Reitoria da Universidade do Porto, a partir das 18h00 para uma noite memorável. Quanto a Bragança, o Centro de Ciência Viva foi o local da festa promovida pelo Instituto Politécnico de Bragança, com início às 21h00.



Noite da Química em Bragança

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:



Noite Europeia dos Investigadores (NEI)

A NEI permite a cientistas e ao público em geral conviverem num ambiente descontraído, fomentando a troca de ideias e experiências e dando a conhecer o quotidiano profissional e pessoal dos cientistas e investigadores. A 23 de Setembro, a Noite Europeia dos Investigadores esteve de volta! Portugal participou mais uma vez nesta iniciativa que une toda a Europa. Com esta grande festa da Ciência pretendeu-se suscitar a curiosidade dos jovens pela ciência e pelos vários métodos de investigação e demonstrar que a ciência não é tão complicada como habitualmente se julga. A NEI foi comemorada por todo o país, contando com a participação de várias Instituições e Centros Ciência. Esta iniciativa foi promovida pela Comissão Europeia, o 7º Programa-Quadro e Marie Curie Actions.

EXPRESSÃO PLÁSTICA E ARTÍSTICA:

Teatro “Questão de Ar”

No âmbito das comemorações do Ano Internacional da Química, foi desenvolvida uma peça de teatro para comunicar ciência com o título “Questão de Ar”. Esta peça resultou de uma parceria entre a Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro e os Departamentos de Física e de Comunicação e Arte da Universidade de Aveiro. “Questão de Ar” é dirigida ao público em geral, maiores de 12 anos, e foi novamente apresentada no dia 23 de Setembro na Fábrica Centro de Ciência Viva de Aveiro.

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

Ciclo de Cafés de ciência

Num ambiente não-formal, na companhia de ilustres convidados e saboreando um agradável café, a conversa fluiu por entre os incontáveis pormenores científicos presentes no dia-a-dia, nomeadamente:

▪ Conversas à vela

Esta iniciativa resultou da parceria entre a Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro e o Sporting Clube de Aveiro.

O evento decorreu no dia 24 de Setembro, no Hotel Moliceiro, e contou com Delmar Conde como convidado, um velejador e construtor naval de referência.

▪ Ciência gourmet

Actividade da Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro resultante de uma parceria com a Latina Adega. Esta sessão abordou, no passado dia 30 de Setembro, os ovos-moles de Aveiro e contou com Manuel A. Coimbra, do Departamento de Química da Universidade de Aveiro e Patrícia Naia, da Apoma, como convidados.

One Century of chemical adventure in genetics – Wanda Viegas, CBAA/ISA, Portugal

28 de Setembro, Biblioteca da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa



Café de Ciência :: Química para um futuro sustentável

No dia 28 de Setembro, o Café de Ciência na Assembleia da República foi dedicado à Química e aos seus impactos na sociedade. *A Química está cada vez mais presente no nosso quotidiano. Alimentação, vestuário, medicamentos, próteses, papel, tintas, construção e energia fazem parte de um universo onde a Química é um factor de inovação. Novas moléculas, que possam servir de base para novos medicamentos e novos materiais, são apenas alguns exemplos do impacto da Química nas nossas condições de vida. Um futuro sustentável depende da nossa capacidade para produzir mais com menos recursos. A Química cria novos processos de produção, com menor impacto ambiental e com menor dispêndio de energia e de matérias-primas.* Este Café de Ciência abriu um debate informal entre deputados e especialistas desta área científica, de forma a reforçar redes de contactos para apoiar a decisão política no conhecimento científico. Foi uma iniciativa conjunta da Ciência Viva e da Comissão Parlamentar de Educação, Ciência e Cultura, em parceria com o CLA – Con-

selho dos Laboratórios Associados. Este ano o Café de Ciência contou também com a colaboração da Sociedade Portuguesa de Química. Foram abordados os impactos da Química na sociedade, nomeadamente:

- × Ambiente: a revolução da Química Verde
- × Saúde: do apoio ao diagnóstico à produção de novos fármacos
- × Alimentação: da produção e conservação à gastronomia molecular
- × Energia: maior eficiência e menor impacto ambiental
- × Materiais: das novas próteses às roupas funcionais



EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

Noite da Química :: Covilhã

O Departamento de Química convidou os seus alunos a participarem na Sessão de Boas Vindas que se realizou no dia 29 de Setembro, no âmbito da “Noite da Química”, comemorando o Ano Internacional da Química.

Programa:

21h00 Abertura pelo Magnífico Reitor da UBI

Vice-Reitor para o Ensino e Internacionalização

Presidente da Faculdade de Ciências

Presidente do Departamento Química

21h30 Experiências



Experiência na Noite da Química da Covilhã

LIVROS E PUBLICAÇÕES:

Newsletters mensal SPQ e quinzenal AIQ

OUTUBRO

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

Stereoselective reactions promoted by metal-free catalysts, Prof. Maurizio Benaglia, Departamento de Quími-

ca Orgânica e Industrial, Universidade de Milão
6 Outubro, Colégio Luís António Verney, Évora

“A Química vista por... um artista” – Heitor Alvéolos

7 de Outubro, Anfiteatro Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

CONGRESSOS:

Nanoschool 2011 – “From chemical topology to cages and molecular machines: the transition metal approach”, Professor Convidado: Prof. Jean-Pierre Sauvage, Northwestern University, EUA



De 10 a 14 de Outubro, o Centro de Química da Madeira levou a efeito

a sua quarta edição da Nanoschool, desta vez tendo, como convidado especial, Jean-Pierre Sauvage, Professor da University of Strasbourg e da Northwestern University (EUA), e membro da Academia Francesa de Ciências. Foi ainda apresentada a palestra, aberta ao público em geral, no dia 12 de Outubro, intitulada “Multicomponent transition metal complexes: from charge separation to light-driven molecular machines”.

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

Semana da Química em Estarreja

As empresas Air Liquide, AQP, Cires, CUF e Dow, em parceria com a Câmara Municipal de Estarreja, promoveram de 11 a 14 de Outubro de 2011 uma semana dedicada à Química. O evento teve lugar no Cine-Teatro de Estarreja e contou com a participação de mais de 3500 alunos. Destinou-se a todos os alunos, do 1º ciclo ao 12º ano, das escolas do Concelho de Estarreja. Organizado no âmbito do Ano Internacional da Química (AIQ), contou com duas sessões diárias de um espectáculo didáctico, “Química por Tabela 2.0” (produzido e encenado pela Fábrica – Centro Ciência Viva), totalmente dedicado ao tema da Química, pretendendo sensibilizar os jovens para a descoberta desta ciência, provando que também se pode aprender fora da sala de aula e de forma divertida.

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

Interactions of DNA with cationic surfactants and proteins: gels and nanoparticles – Maria da Graça Miguel, Universidade de Coimbra, Portugal

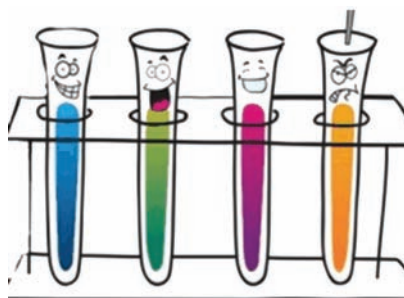
12 Outubro, Biblioteca da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa

PRODUTOS AUDIOVISUAIS:



Química do Universo

A Fundação Navegar apresentou a nova sessão de Planetário, “Química do Universo”, que estreou no dia 14 de Outubro. Associando-se ao Ano Internacional da Química, o Planetário de Espinho apresentou uma sessão sobre a “Química no Universo”, na qual aborda a forma como os diferentes fenómenos e interações se manifestam no cosmos. Conta com dois apresentadores muito especiais: Ana Bacalhau dá a sua voz a uma Estrela e José Rebola a um Cientista. Juntos desvendam os mistérios do maior de todos os laboratórios: o Universo. A sessão integra-se num conjunto de sessões que o Planetário de Espinho tem disponíveis ao público, adequadas aos diferentes níveis de ensino e a distintas faixas etárias, acompanhando as mais recentes potencialidades tecnológicas e visuais, criando uma sessão com um carácter visual



muito forte. Esta sessão é dirigida em particular aos estudantes do 2º Ciclo e Secundário, procurando integrar duas ciências afins, a Astronomia e a Química, mas poderá ser apreciada por toda a família. Está em exibição desde 15 de Outubro, aos Sábados, Domingos e Feriados, às 16h00.

ACÇÕES DE FORMAÇÃO / WORKSHOPS:

Estrutura de Proteínas: da Ciência para a Arte

As proteínas são máquinas moleculares ubíquas no mundo biológico, desempenhando uma enorme variedade de funções que vão desde o suporte estrutural à regulação da expressão genética, passando pela defesa, transporte e catálise de milhares de reacções químicas que ocorrem nos organismos vivos. Estas variadíssimas funções são suportadas por estruturas moleculares tridimensionais complexas que permitem interacções com um elevado grau de especificidade com as moléculas alvo, sejam elas outras proteínas, ácidos nucleicos (ADN e ARNs) ou pequenos compostos (metabolitos, medicamentos, xenobióticos). Entender a função das proteínas e actuar na modelação da sua actividade de forma racional implica antes de tudo conhecer a sua estrutura tridimensional. A visualização e análise da estrutura tridimensional de proteínas, no passado uma tarefa reservada a um número muito restrito de especialistas, está hoje em dia acessível a todos. Um computador pessoal e uma ligação à internet é tudo o que é necessário.

Nesta acção, foi apresentada uma ferramenta informática intuitiva e de acesso livre – YASARA View – que pode ser usada na sala de aula para que professores e alunos dissequem as complexidades da estrutura proteica e assim melhor entendam o papel central das proteínas na manutenção da Vida.



Semana da Química em Estarreja

Como exemplo de aplicação do estudo da estrutura de proteínas, foi feita uma breve introdução às estratégias actuais de procura computacional de compostos com potencial terapêutico e como os cidadãos, através da plataforma de computação voluntária Ibercivis, podem participar nesta procura. Esta sessão contou com o apoio da associação Nova Agora – CFAE – e fez parte das comemorações do Ano Internacional da Química 2011. Realizou-se no dia 15 de Outubro no Museu da Ciência da Universidade de Coimbra.

PRODUTOS AUDIOVISUAIS:

A Química na Rádio Renascença :: Há Química por todo o lado: no amor, na roupa, na cozinha...

Há Química por todo o lado... e este ano ainda mais!

Mesmo que não lhe demos muita importância ou mesmo que tenha sido a disciplina que menos gostámos quando estávamos na escola, a Química está em quase tudo no nosso dia-a-dia. Do seu perfume preferido, ao seu almoço, passando pelas sensações que invadem o seu cérebro e o seu corpo quando vê aquele alguém especial, a química está sempre lá! E agora a química também está na Renascença! De 17 a 21 de Outubro a Rádio Renascença (RR) convidou os seus ouvintes a saber como a química explica muito do que se passa à nossa volta e como tem um papel relevante para aumentar o nosso bem-estar. Para tal, bastava acompanhar as reportagens e as entrevistas e aproveitar para desfazer algumas ideias pré-concebidas sobre a química. Não é porque um produto tem químicos que isso tem de ser necessariamente negativo, já pensou como seria a água que bebemos se não fosse tratada? Pode agradecer... à Química! Deixe o rádio ligado na Renascença para saber a influência da química na cozinha, na roupa ou até no amor!

17 Outubro:

Descubra a química no seu dia-a-dia!

Talvez nem desconfie, mas a Química está presente nos momentos mais simples do seu dia como, por exemplo, quando está a lavar os dentes. Cristina Oliveira, investigadora da Faculdade de Ciências, ajuda-o a

descobrir que, afinal, a Química não ficou lá longe, nos seus tempos de escola.

Esta 2ª, descubra a química que temos!

A RR vai falar-lhe de um dos grandes “bichos de sete cabeças” do ensino – a Química! Esta noite, descubra como ela está presente em tantas coisas do nosso dia-a-dia.

18 Outubro:

Já ouviu falar em roupa inteligente e funcional?

Maria José Lourenço é Professora do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. Faz investigação na área da Nanotecnologia e um dos seus trabalhos é perceber, por exemplo, como a Química se pode aplicar naquilo que usamos todos os dias como, por exemplo, a roupa. Descubra como a roupa pode ser inteligente e funcional... tudo graças à Química!

19 Outubro:

Podíamos viver sem a Química?

Se calhar até podíamos, mas não seria a mesma coisa!

Medicamentos, roupa, as cores que conhece, enfim, a Química está em todo o lado e é por isso que é tão importante prestar atenção ao que vai acontecer a propósito deste Ano Internacional da Química. Para que fique a par de tudo, esta terça-feira, a Sónia Santos e o Joaquim Luís Faria, Secretário-Geral da Sociedade Portuguesa de Química, explicam-lhe por que é que esta disciplina, que tantas vezes tem uma conotação negativa, faz parte da vida de todos nós!

Sabe qual é a cor da Química?

A Química é verde.

Quem o diz é Joaquim Luís Faria. Ele é Secretário-Geral da Sociedade Portuguesa de Química e explica-lhe por que é que esta disciplina, que tantas vezes tem uma conotação negativa, também é... verde! Medicamentos, roupa, as cores que conhecemos, enfim, a Química está em todo o lado e, por isso mesmo, 2011 é o Ano Internacional da Química. Em Portugal, a Sociedade Portuguesa de Química é a entidade que está a promover a maioria das iniciativas.

20 Outubro:

Aquilo da “química entre duas pessoas” existe mesmo?

A RR fala-lhe da química do amor, nomeadamente, das substâncias que actuam no nosso organismo – no cérebro em particular – e que são responsáveis pelas sensações e comportamentos que associamos ao Amor.

Química: uma ciência apaixonante

Esta é uma ciência que está presente em vários momentos da sua vida e até, imagine, no amor. Filomena Martins é Professora de Química na Faculdade de Ciências de Lisboa e, dia após dia, leva os seus sentimentos mais humanos até ao laboratório.

21 Outubro:

Química: do laboratório para a sua cozinha

Na sua cozinha acontecem, a todo o instante, reacções químicas: descubra a sua influência na sua alimentação. É a base da cozinha molecular: analisar, do ponto de vista científico, os fenómenos que ocorrem quando se cozinha. Porquê? Oiça a explicação de Joana Moura, investigadora ligada à área da alimentação.

Não negue à partida uma ciência que desconhece!

Saiba como a Química pode ajudá-lo a ter uma alimentação mais saudável. Na sua cozinha acontecem, a todo o instante, reacções químicas. Sabia? Joana Moura é investigadora ligada à área da alimentação e explica-lhe porque é que é bom conhecer melhor alguns dos fenómenos químicos que acontecem na sua cozinha, de modo a conseguir tirar disso o melhor para si!

Onde está a química no seu dia-a-dia?

Acha que consegue achar a química na sua cozinha?

A RR vai dar-lhe uma ajuda a encontrar a química dentro da sua própria casa. Na sua cozinha também há química, sabia?

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

Chemistry and the Chemist Public Awareness of their contributions to Society and the Health Care Industry, Bill Heggie, Hovione, Sociedade de Química S. A., Portugal

Dia 19 de Outubro na Biblioteca da

Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa

“...Uma Questão de Química” – Conferência A Química é quem mais ordena, Jorge Calado

A série intitulada «...uma questão de Química» é constituída por um conjunto de motivadoras conferências, proferidas por notáveis e conhecidas figuras da investigação em química no nosso país e sobre temas essenciais da ciência contemporânea. As reflexões, bem como os debates com o público, vão servir certamente para solidificar e perfumar os caminhos que teremos de percorrer neste século à procura de um mundo melhor. Jorge Calado foi o primeiro conferencista deste ciclo, no dia 19 de Outubro, na Fundação Calouste Gulbenkian, com “A Química é quem mais ordena”:

“A química quer saber de que é que são feitas as coisas, e o que acontece quando pomos as coisas em contacto umas com as outras (para fazer ainda outras). Ordenar é contar.

Desde o início a química contou com números pequenos. Os Gregos reduziram tudo a quatro elementos e a quatro propriedades, mais os amores e ódios entre eles. Como diziam os pitagóricos, “Avancem do um até ao quatro e surge o dez, a mãe primordial de todas as coisas”. De facto, $1+2+3+4 = 10$, tantos quantos os dedos das duas mãos. A química moderna começa com a redefinição do conceito de elemento e a sua associação ao átomo. No final do século XVIII e princípio do século XIX percebeu-se que os elementos se combinavam na proporção de números inteiros e pequenos. Por exemplo, a ferrugem (óxido férrico) são três partes de oxigénio e duas de ferro. Daí à teoria atómica (de Dalton) foi um passo. Entretanto percebia-se que a química da vida (plantas e animais) estava ligada ao carbono (e ao hidrogénio, oxigénio, nitrogénio, etc). A química inorgânica era mais difícil de sistematizar. Até que surgiu uma espécie de kalmuque russo, com grandes qualidades pedagógicas e a precisar de ganhar dinheiro. Escreveu um livro – o melhor livro de química de todos os tempos? – e houve luz, com a Tabela Periódica. Dalton e Mendeleev puseram a química na ordem, e hoje é a química quem mais ordena. Pelo meio, houve várias revoluções...”

Serões da Bonjóia :: “Haja Luz! Viagem à Volta de um Livro”, Jorge Calado

Os Serões da Bonjóia pretendem ser o reviver de tertúlias à moda portuguesa e consistem em conferências/encontros/concertos/debates, regulares, subordinados a temas e actividades diversas, na Quinta da Bonjóia. O objectivo é contribuir para a formação/informação dos cidadãos em geral e promover a dinamização de uma zona menos conhecida da Cidade. E porque 2011 é o Ano Internacional da Química, no dia 20 de Outubro, o convidado foi o Prof. Doutor Jorge Calado com “Haja Luz! Viagem à Volta de um Livro”:

“O livro como objecto. Antecedentes e inspirações. Porque é que está tudo ligado. A importância do fogo. De que é que são feitas as coisas? O caos e o gás. A importância da electricidade. A serendipidade e a descoberta simultânea. Os números inteiros e pequenos. A teoria atómica. O prazer da descoberta. A ordem mental das coisas. Visualização e imaginação. E agora?”

Um Serão da Bonjóia, onde o autor misturou a sua experiência pessoal com a química em geral, tentando mostrar porque é que a química é a ciência central.

II Ciclo de Conferências Científicas :: “Os Meus Heróis: viagens à volta da Química”, Jorge Calado

O Centro de formação de Associação de Escolas de Vila Nova de Famalicão tem vindo, desde o ano transacto, a desenvolver ciclos de conferências científicas. Este ano lectivo, dado estarmos em 2011, Ano Internacional da Química e Ano Internacional da Floresta, iniciou-se um II Ciclo com 3 temas de Química e um sobre a Floresta Portuguesa. A primeira conferência, Os Meus Heróis: viagens à volta da Química, pelo Prof. Doutor



Prof. Doutor Jorge Calado no Serão da Bonjóia

Jorge Calado, foi no dia 21 de Outubro. Neste dia teve também lugar a apresentação do livro do conferencista, *Haja luz! Uma história da Química através de tudo*.

From molecules to the course of infection, Maria Mota, Instituto de Medicina Molecular – Lisboa

Dia 26 de Outubro na Biblioteca da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa

Química e a Investigação Forense, Maria João Caldeira, Laboratório de Polícia Científica – Polícia Judiciária
Dia 26 de Outubro no Anfiteatro 4, CLAV, Universidade de Évora

EXPRESSÃO PLÁSTICA E ARTÍSTICA: Teatro Quimicómico

No âmbito das celebrações do Ano Internacional da Química, a Universidade de Aveiro recebeu o teatro de ciência «Quimicómico», que tem na Química o elemento central de toda a peça. Este espectáculo, destinado a crianças a partir dos quatro anos, esteve em cena no auditório da Reitoria da Universidade de Aveiro no dia 28 de Outubro, com uma sessão dedicada exclusivamente às escolas e, no dia 29 de Outubro, para o público geral.

«Quimicómico» é um espectáculo de teatro cómico, em que a Química é o elemento central de toda a peça. Trata-se de um espectáculo dinâmico, com um discurso muito acessível e efeitos visuais surpreendentes, que promete divertir o público e, ao mesmo tempo, despertar a veia científica de miúdos e graúdos. Mensagens invisíveis, um relógio vegetal, uma máquina de aumentar/encolher coisas, um chuveiro de CO₂, líquidos que mudam de cor, pipocas e bombocas, couve roxa, cores fluorescentes e fosforescentes, algua sátira social, muita música (toda original) e acima de tudo muito e bom



Ensaio do Teatro Quimicómico

humor, eis os ingredientes para um espectáculo que não deixará ninguém indiferente.

Este espectáculo resultou de uma produção da companhia de teatro «Encerrado para Obras» em co-produção com o Exploratório Infante D. Henrique – Centro Ciência Viva de Coimbra.

CONFERÊNCIAS / PALESTRAS:

“A Propósito da Falácia”

Nos dias 26 e 27 de Outubro, a Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, com o ciclo de debates “A propósito da Falácia”, despertou a comunidade académica com a discussão de temas como ética e ciência. O primeiro dia contou com a apresentação do livro “Falácia” do cientista Carl Djerassi e o debate “Ciência e Ética”, com a presença de Alexandre Quintanilha. Já no segundo dia discutiu-se a “Arte e Ciência - diferentes perspectivas” e contou com a presença de Carl Djerassi, Lúcia Rosas (FLUP) e Maria Clara Paulino (FLUP). A moderar os debates estiveram Zulmira Santos e Manuel João Monte.

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

Doutoramento Honoris Causa – Carl Djerassi

Carl Djerassi, Prof. Emérito de Química da Universidade de Stanford, recebeu o seu 25º título de Doutor Honoris Causa, concedido pela Universidade do Porto, sob proposta da Faculdade de Ciências, no dia 28 de Outubro, no Salão Nobre da Reitoria da Universidade do Porto.



EXPRESSION PLÁSTICA E ARTÍSTICA:

Teatro Falácia

Falácia não é um espectáculo qualquer mas, na realidade será um espectáculo INVULGAR!...

Invulgar porque não é uma coisa que se veja todos os dias. Invulgar porque talvez nunca mais volte a ter a possibilidade de ver. E mais: FALÁCIA é feita a pensar em si!

Nesta peça há um debate vivo, audacioso e cativante, com sentimentos amorosos a cruzarem-se e a prender o espectador pelo “bico”. Num importante museu europeu, em Viena de Áustria, encontra-se a estátua de um rapaz nu, atribuída à era romana e que é a jóia da coroa do museu. Mas a ciência, através da química, desmistifica aquela era. E o valor artístico da obra, para além da data da sua feitura? Aqui está um espectáculo para quem se interessa por tudo que é importante na vida mas, muito especialmente, para quem se interessa por QUÍMICA e/ou MUSEOLOGIA.

Dia 28 de Outubro foi a estreia do espectáculo Falácia, do grande cientista de renome mundial e dramaturgo Carl Djerassi. Entre 29 de Outubro e 30 de Novembro esteve em cena todos os



Noite da Química em Lisboa

dias, excepto nas segundas-feiras, no Teatro do Campo Alegre, Porto. Este espectáculo inseriu-se no Centenário da Universidade do Porto e nas comemorações do Ano Internacional da Química.

EXPOSIÇÕES E OUTROS EVENTOS:

Noite da Química :: Lisboa

O Instituto Superior Técnico (Universidade Técnica de Lisboa), as Faculdades de Ciências e de Farmácia (Universidade de Lisboa) e a Faculdade de Ciências e Tecnologia (Universidade Nova de Lisboa) apresentaram “A Noite da Química” no dia 31 de Outubro a partir das 18h30. Experiências, Actividades, Documentários e uma peça de Teatro sobre Marie Curie (pela Companhia Teatro Extremo) compuseram esta noite especial, integrada nas comemorações do Ano Internacional da Química.

LIVROS E PUBLICAÇÕES:

Newsletters mensal SPQ e quinzenal AIQ

Vanda Capitolino
(quimica2011@spq.pt)
www.spq.pt/quimica2011

O ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA COMEMORADO PELOS QUÍMICOS DA CENTENÁRIA FCUP

A importância da Química em todos os aspectos da sociedade actual é incontornável, mas o interesse e entusiasmo com que, no decurso de 2011, têm surgido as iniciativas associadas às comemorações do Ano Internacional da Química (AIQ), manifestam uma consolidação do seu reconhecimento por um sector público mais alargado. Poder-se-á dizer que o sucesso deste movimento, em Portugal, não será alheio à aposta de muitos professores, em diversos níveis de ensino, no desenvolvimento de inúmeras acções de celebração e promoção da Química, a par de uma acção dinamizadora da centenária Sociedade Portuguesa de Química, numa demonstração da sua vitalidade.

O Departamento de Química e Bioquímica (DQB) da FCUP é um parceiro activo em todas estas comemorações, marcando a sua presença em interessantes eventos que tiveram lugar este ano. Destacam-se, como exemplo, a realização de um Ciclo de Conferências “A Química vista por...” (um químico, um físico, um gastrónomo, um político, um geneticista, um psicólogo, um artista e um matemático), a organização de quatro congressos internacionais (*5th Theoretical Biophysics Symposium* (THEOBIO 2011), *2nd Iberic Meeting on Medicinal Chemistry* (2IMMC), *4th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces* (RICI4), *10th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis* (MEDIC-TA 2011)), a realização de um jantar-convívio de “Cozinha Molecular” largamente publicitado pelos meios de comunicação, a atribuição pela UP do título de Doutor Honoris Causa ao eminente Professor Carl Djerassi (o químico responsável pela primeira síntese de um esteróide contraceptivo oral – “a pílula”), a organização da exposição “Moléculas Magníficas” no e-Learning Café da U.P. e, posteriormente, na Fundação José Rodrigues, a iminente publicação de “Falácia” (de Carl Djerassi, livro traduzido pelo nosso colega químico João Monte, a editar pela UP) ou a representação desta



Abertura do AIQ na FCUP, em 28 de Janeiro de 2011: Maria João Ramos (ao centro), António Fernando Silva (à direita) e Ana Reis (à esquerda), respectivamente Presidente do DQB, Director da Faculdade e dinamizadora do evento, num registo da comemoração

obra pelo Grupo de Teatro Seiva Trupe, desde Outubro. Muito interessante, embora de um cariz diferente, foi a colaboração do DQB no espectáculo ‘Química à Mostra’ integrado na ‘Mostra da U.P. 2011’, realizada no Pavilhão Rosa Mota da cidade do Porto.

No âmbito do Ano Internacional da Química, o DQB disponibilizou ainda a oferta de vários cursos, versando temas tão diversos quanto o da ‘Segurança Química’, ou o de ‘Adesivos Aplicados a Arte Contemporânea’ (organizado pela 20121 Conservação e Restauro), passando por outros tópicos como ‘Actividades Laboratoriais para o 12º Ano’, ‘Tópicos de Química Física para Compreensão do Mundo Actual’, ‘Química e Qualidade de Vida’, ‘Química e História dos Metais de Transição’, ‘Quadros Interactivos no Ensino da Química’, ‘Multimédia no Ensino da Química’ ou ‘Plataformas e Experiências de e-learning em Química’.

Sendo uma colaboração já habitual, é de referir também a participação do DQB nas Olimpíadas de Química+

2011 e nas Olimpíadas de Química Júnior 2011, ambas promovidas pela acção dinamizadora da SPQ: na primeira competição inscreveram-se, na prova a decorrer na UP, 55 Escolas Secundárias, tendo-se apresentado a concurso 42 equipas, num total de 126 estudantes do 10º e/ou 11º anos, acompanhados por um professor por cada equipa/Escola; para participar nas Olimpíadas Júnior, concorreram 54 Escolas, tendo comparecido 46 escolas/138 estudantes dos 8º e/ou 9º anos (cada equipa foi acompanhada por um ou dois professores da respectiva Escola). Será de referir, ainda, que uma docente do DQB foi designada como mentora de Química, integrando a delegação que representou Portugal na nona Olimpíada da Ciência da União Europeia (*9th European Union Science Olympiad*, 9th EUSO), decorrida na República Checa em Abril de 2011.

No Verão de 2011, no âmbito da 7ª edição da Universidade Júnior (U.Jr.) da Universidade do Porto, o DQB abriu mais uma vez as portas, reforçando a sua participação nas actividades químicas com a apresentação de

quatro propostas para o “Verão e Projecto”, destinadas a estudantes do 9º ao 11º anos de escolaridade. O desafio lançado teve uma aceitação muito boa, com a inscrição e frequência dos projectos (“A electroquímica é...”, “A Química: uma ciência sem fronteiras”, “Química em acção”, “Química no NanoMundo”) por cento e sessenta e cinco jovens, durante uma semana, de 27 de Junho a 22 de Julho de 2011.

Integrada nas actividades da U.Jr., teve ainda lugar no DQB, de 4 a 8 de Julho de 2011, a 5ª Escola de Química da Universidade do Porto, dirigida a estudantes dos 10º e 11º anos do Ensino Secundário, de elevado nível, para evidenciar oportunidades actuais em Química e apostas no futuro. A Escola de Química 2011 proporcionou um estágio a quinze jovens, provenientes de diferentes concelhos do País, cada um dos quais participou no desenvolvimento de um projecto científico em curso no DQB, integrado na respectiva equipa de investigação. No último dia da Escola, decorreu, com grande sucesso, um Seminário, em que cada um dos formandos apresentou uma comunicação, permitindo uma divulgação das actividades científicas desenvolvidas globalmente. A adesão dos membros do DQB (professores, investigadores, estudantes de mestrado e de doutoramento) ao acompanhamento destes jovens foi grande, mas o retorno foi mais compensador, pois a postura destes *investigadores juniores*, a sua criatividade e o seu interesse pela inovação, superaram

tudo o que seria de esperar. Todos os representantes dos órgãos académicos convidados (Reitor Prof. Marques dos Santos, vice-Reitor Prof. António Marques, Director da FCUP, Presidentes dos Conselhos Científico e Pedagógico da FCUP, Secretário Geral da SPQ) estiveram presentes nas sessões de abertura e/ou encerramento desta Escola de Química, dando um forte sinal do reconhecimento conferido à importância do evento na promoção desta área da ciência.

Ao longo de 2011, a Universidade do Porto está a comemorar uma efeméride de grande simbolismo: o centenário da sua fundação. A FCUP é, desde a sua formação, em 1911, também há um século, a Escola desta Universidade responsável pelo Ensino das Ciências Exactas e Naturais, continuando a ser responsável por graduação em áreas das Ciências Exactas e Naturais, em que a Química se inclui. Foi também em 1911 que Ferreira da Silva, professor de Química na Academia Politécnica do Porto, se tornou director dessa mesma academia e o primeiro presidente da Sociedade Portuguesa de Química. Antecedendo o início das comemorações do centenário da Universidade do Porto, esteve patente em Novembro e Dezembro de 2010, no actual edifício da Reitoria da UP (instalações da FCUP desde a sua fundação até à sua mudança para as novas instalações), a exposição “Ferreira da Silva: o Homem, o Professor, o Cientista”. Esta exposição, comissariada por Carlos Corrêa, professor de

Química da UP, reuniu obras e aparelhos científicos utilizados por Ferreira da Silva, pertencentes ao espólio do Museu da Ciência da Faculdade de Ciências, e constituiu o ponto alto da homenagem que a universidade dedicou ao histórico químico e académico português.

No dia 23 de Setembro de 2011 teve lugar a Noite da Química no espaço do Átrio de Química do antigo edifício da FCUP. O evento foi promovido pela SPQ, a nível nacional, e a adesão pelo público, no Porto, foi extraordinária, ultrapassando todas as nossas expectativas.

De 15 de Outubro a 15 de Novembro de 2011, a Sala de Exposições do DQB abriu as suas portas com uma exposição sobre Marie Curie à qual se seguiu, a 9 de Dezembro, uma palestra sobre a mesma prémio Nobel da Química, cuja distinção perfaz, também este ano, o centenário da sua atribuição.

Para finalizar este registo, refere-se a festa de encerramento do AIQ, a 15 de Dezembro de 2011, na qual foi lançado um selo comemorativo, por iniciativa do DQB, que deixará aos vindouros uma marca do Ano Internacional da Química.

Maria das Dores Ribeiro da Silva
(mdsilva@fc.up.pt)

Docente do Departamento de Química e Bioquímica da FCUP

ACÁCIA MIMOSA – A ESSÊNCIA DE UMA PRAGA

As diversas espécies da acácia-mimosa são exóticas em Portugal, sendo actualmente consideradas invasoras. Tal acontece porque são plantas pirófitas, as suas sementes são estimuladas pelo calor do fogo e germinam rapidamente. Por outro lado, têm uma enorme capacidade para se multiplicarem vegetativamente.

Com o objectivo de ajudar a resolver este problema ambiental, e no âmbito do Ano Internacional da Química, desenvolvemos este projeto que pretende divulgar possíveis formas de

explorar este recurso de modo a que seja útil ao nosso país, transformando uma praga em mais-valias. Para tal, contamos com os conhecimentos de Química e suas aplicações. Com este projecto mostrámos que a Química, nas mãos de jovens interventivos e construtivos, pode ajudar a encontrar respostas para muitos problemas.

DESCRIÇÃO DAS ACTIVIDADES

Este projecto teve como objectivos divulgar a Investigação Científica e

aplicar conhecimentos de Química e Física a situações do quotidiano.

Começámos por nos debruçar sobre a extracção do óleo essencial da flor, pois sabemos que é utilizado na produção de perfumes e outros cosméticos de elevada qualidade. Entretanto, apercebemo-nos de que as aplicações da acácia-mimosa não se limitam à indústria dos cosméticos, ela tem também muitas potencialidades em diversas indústrias químicas tais como: produção de tintas e corantes; a extracção de goma-arábica, muito uti-

lizada na produção de medicamentos, de vinho e colas; a extração da celulose, para produção de pasta de papel;

a produção de contraplacados; a utilização como biomassa, entre outras.

No Laboratório de Química os alunos realizaram as seguintes experiências:

Bancada 1: A Química na Arte

Produção de tintas à base de corantes, da flor da mimosa (amarelo), da folha (verde) e do carvão (preto).

Os veículos testados foram: clara de ovo, gema de ovo, óleo de linhaça, cola de madeira...



Bancada 2: A química na Indústria Têxtil

Os alunos tingiram tecidos de algodão.



Bancada 3: A Química na Indústria da Pasta de Papel

Extracção da fibra de celulose para produzir pasta de papel.



Bancada 4: A Química na Indústria Farmacêutica

Extracção da goma, goma-arábica, da casca da Acácia para produção de xaropes e outros medicamentos.



Bancada 5: A Química e a Biotecnologia

Apicultura - produção de cera e mel, de excelente qualidade.



Bancada 6: A Química e os Materiais

Produção de contraplacado.
Utilização da madeira para mobiliário,
postes, construção naval...



Bancada 7: A Química na Produção de Energia (Biomassa)

A combustão, reacção exotérmica.



Bancada 8: A Química na Indústria dos Perfumes e outros Cosméticos

Extracção do óleo essencial da flor,
por várias técnicas.

Destilação por arrastamento de vapor,
extracção por solvente (extractor de Soxhlet),
destilação a pressão reduzida, enflourage ou enfloração.



Bancada 9: A Decoração de Espaços

Construção de coroas de ramos de
Acácias.



Ana Vaz Pinto e Pedro Vaz Pinto
Alunos do 11.º B, 10.º A e 7.º A
(pvazp@sapo.pt)
Instituto D. João V, Louriçal

HAJA LUZ! UMA HISTÓRIA DA QUÍMICA ATRAVÉS DE TUDO

RAQUEL GONÇALVES-MAIA*

Jorge Calado

IST Press

614 páginas * ISBN 978-972-8469-85-6



Tal como Jorge Calado, perante “Haja Luz!”, optou por um revolucionário modelo de divulgação de conhecimentos, também eu, nesta apreciação crítica, me decidi por um discurso invulgar, eventualmente desordenado, seduzida pela iluminada inspiração do autor. Onde, começo pelo fim, que talvez seja, afinal, o princípio.

Na badana direita da contracapa esconde-se uma fotografia do escritor. Espartilhado entre duas pedras megalíticas de considerável porte, Jorge Calado impõe-se e espreita. Com um olho só. E, mesmo com um olho só, vê e transmite mais do que o suficiente para pôr os cabelos em pé. Deslumbrado, deslumbra-nos.

É tanto este olhar sobre a Criação, sobre o caldeirão das ideias fervilhantes, que, à guisa de sopa de pedra, o criador “relaciona tudo com tudo”. Ah, a Química!, é claro, é ingrediente forte, venha ela de Prometeu ou de Frankenstein, de Davy, Cavendish, Lavoisier, Boyle ou Pasteur. Mas, sem especiarias, seria fraco o seu sabor. Jorge Calado adiciona, então, Música (em boa dose), Artes, Literatura... e, nesta roda da vida, ainda lhes pede que tragam os amigos e os inimigos. A paisagem sócio-política do Ociden-

te é fundamental para a trama de fios entrelaçados.

Fundamental é, também, uma boa dose de energia – a Termodinâmica é apenas um dos domínios maiores do autor –, seja ela proveniente da chama de uma vela de Faraday ou de Bachelard, do brilho faiscante dos diamantes de Marilyn Monroe, do século das Luzes ou dos incríveis raios dos Curie. Faz milagres no preparado.

Aqui, as mil e uma noites são sempre iluminadas, tudo o que luz é mesmo ouro.

A Geografia é igualmente importante neste livro. Muito antes da era da globalização, das grandes viagens que parecem acabar antes de começarem (e, se rumarmos para Ocidente, por vezes é mesmo assim), já os cientistas eram eficientes *globetrotters*; para eles, o mundo “sempre foi muito pequeno”. E Jorge Calado é um deles, abraça o mundo das ideias e dos factos, com o à vontade de um grande amigo.

Já se disse e redisse que é nas interfaces disciplinares que se encontram os melhores gérmenes de criatividade. O autor usa isso, mas usa-o como ninguém: não cria apenas os gérmenes, cria as próprias interfaces, raras, distintas, brilhantes. E explica-nos o seu “raciocínio lateral” em profundidade,

com focagem preferencial no centro, nos lados e na periferia.

Perguntarão: mas, afinal, “Haja Luz!” é uma história da Química? O autor afirma-o, no título, em letras pequenas e com o acrescento “através de tudo”. Se o leitor for predominantemente ortodoxo sentirá alguma relutância com as ramificações inseridas parágrafo após parágrafo, sempre na esperança que o dia 20 se siga ao dia 21, e o oxigénio ao hidrogénio,... o que raramente acontece. Mas, se for possuidor de uma mente livre, receptiva e abrangente, exclamará “que maravilha!” a cada “extravagância” do autor.

A história da Química está toda nas 614 páginas deste livro. Da Química e de muito mais. Não colocou Michael Faraday, informa-nos o autor, toda a Química na história de uma vela? O pequeno retoque linguístico, no entanto, faz a sua diferença...

A narrativa tem nexos, certamente, tem mesmo uma coerência e uma união tão extraordinárias quanto inusitadas. Começa no princípio, no Genesis de Haydn, e segue um caminho, a Pedra Filosofal, aquele poder capaz de elevar o homem à capacidade de inventar. É uma constante da vida, disse o poeta. E por eles trespassam ordem e liberdade, evoluções e revoluções, centenas de homens e de mulheres.

* Professora catedrática aposentada da FCUL
E-mail: rmcgonc@gmail.com

Cada capítulo de “Haja Luz!”, qual peça de teatro, tem protagonistas próprios, desde logo assinalados à cabeceira. Vão do “ZERO” ao “ONZE!”, isto é, da “Criação” ao “Arquitecturas”, passando, por exemplo, pelo admirável “Uma Descoberta Simultânea”, dedicado ao coração ou ao oxigénio como preferirem, ou “O Baptismo da Energia”, onde a qualidade (saber o que é) se associa inevitavelmente à quantidade (saber quanto é). Segue-se ainda um “Epílogo”, além de apêndices bibliográficos e índices de vária ordem.

Detenhamo-nos no capítulo ZERO. Tem por protagonistas Joseph Haydn, Deus, William Herschel e mais 26 notáveis. É a Música que incute o movimento e o ritmo à escrita, do macroscópico para o microscópico. Primeiro o Universo, em visão geral, depois do Paraíso à Terra, de Vénus à Ilha dos Amores, logo seguidos de inventores de inventários à nossa dimensão: metais, fósseis, plantas e animais. E o sistema da Natureza, enciclopédico,

torna-se vivíssimo na palavra do cientista. Viagens de mais saber, idades finitas e infinitas, sobressaltos em cadadupa... Porquê? Haja amor pela Ciência, independentemente de credos políticos e religiosos, que a curiosidade encontrará uma solução. Ou várias. Pensa-se. Conjectura-se. Sente-se.

O estado da Química toma, então, o seu lugar. Química? O que é a Química? A resposta segue dentro de momentos.

Seria impossível transmitir numa despreziosa recensão o estado de “Haja Luz!”. É magnífico. O pequeno diálogo que estabeleci com o “ZERO”, súpula dos conteúdos desenvolvidos nos capítulos subsequentes, nada mais é do que a centelha de um fósforo mal aceso.

O texto é longo e deve ser lido devagar, saboreado. A luz que ele emana, em golfadas, é imensa e a sua digestão, se a queremos eficaz, terá de ser vagarosamente reflectida.

Leitor, pare agora, desfrute as belas imagens. Tem várias centenas à sua escolha, tarefa de mãos-à-obra com a qualidade inerente a Joaquim Moura Ramos. Continue a leitura. Deixe-se seduzir.

A segurança da escrita corresponde-se com o domínio do saber transversal do autor. Se, na segunda, abundam os factos, as descobertas, os acontecimentos, os erros e a sua remissão – na Química e nas outras áreas do conhecimento, dos químicos e de todos os outros cientistas ou não –, na primeira, reina o discurso lógico, sem floridos mas com derivas, com emoção e entusiasmo, com humor (*dezoito é um bom nome para cão*) e uma certa dose de contemplação contida. Delicioso.

Esta história da Química, que não é bem História, este romance, que quase o é, tem direito a lugar nobre nas leituras da nossa vida. É vital.

MICHAEL FARADAY, A HISTÓRIA QUÍMICA DE UMA VELA *

MÁRIO BERBERAN E SANTOS **

Tradução de Maria Isabel Prata e Sérgio Rodrigues

Imprensa da Universidade de Coimbra, Coimbra 2011

119 páginas * ISBN 978-989-260-087-1



À primeira vista, o assunto parece enfadonho e antiquado. Que há ainda a aprender sobre a combustão de uma simples vela? Não basta uma equação química elementar? Até a experiência clássica da água a subir no copo invertido desapareceu dos manuais es-

colares, pois o efeito é afinal dominado pelo aquecimento transitório do ar e não pelo consumo – apenas parcial até à extinção da chama – do oxigénio (e sem que a produção de CO₂ fosse também devidamente considerada!).¹ Além disso, a vela deixou há muitos anos de ser usada na iluminação quotidiana. Suplantada pela luz eléctrica, foi relegada para o Museu da Técni-

ca, onde se foi juntar à tocha e à candeia, ficando todas arrumadas numa vitrine meio escondida, por serem objectos pouco interessantes quando apagados. Nas casas portuguesas as velas estão ainda em destaque, é certo, mas apenas pelo valor decorativo dos suportes: palmatórias, castiçais, e candelabros de vários lumes, muitos em prata, outrora refulgente à luz

* Texto baseado na apresentação do livro, efectuada em 28-04-2011 no Anfiteatro do Laboratório Químico da Universidade de Coimbra.

** Centro de Química-Física Molecular
Instituto Superior Técnico
E-mail: berberan@ist.utl.pt

clara das velas de cera de abelha, e que constituem poderosas evocações de tempos de opulenta “luz química”. Isto sem esquecer que a vida das casas humildes era então comandada pelo astro-rei, alumando-se parcimoniosamente o lar com fuliginosas e mal-cheirosas candeias de azeite e velas de sebo. Hoje nenhum estudante português de Química, por mais recôndita que seja a sua terra, e ainda que a aplicação (ou o desespero ante a prova iminente) o leve a estudar pela noite fora, conhece por experiência própria o verdadeiro significado de “queimar as pestanas”. E quantos sabem a origem de expressões como “de fio a pavio” e “gastar cera com ruim defunto”, ou conheceram as lâmpadas de incandescência com o poder iluminante expresso em velas? Para além do bolo de aniversário e do banalizado “jantar romântico”, já só nas cerimónias religiosas encontramos velas acesas, por vezes imponentes, caso dos grandes e pesados círios. Contudo, em todas as situações indicadas, a Química dificilmente ocupará o pensamento, ou será tema apropriado de conversa. Excluindo pois festas e jantares de *nerds*, talvez apenas durante uma falha geral de corrente, felizmente bastante rara, e enquanto se vão acendendo as velas de emergência com todo o cuidado, para não provocar um incêndio, se possa prender a atenção de alguém com a física e a química daquele brilho subitamente tão importante, e que fascina ao ponto de queimar asas...

A História Química de uma Vela, primorosamente traduzida e anotada³, e precedida de uma introdução esclarecedora pelo Prof. Sebastião Formosinho, é a transcrição de seis palestras de Faraday, proferidas em 1860/61 na Royal Institution, em Londres, tendo por tema principal as velas de estearina, então relativamente recentes, e que foram acompanhadas por mais de setenta demonstrações. Nesta altura, já Faraday, com 69 anos, estava bastante doente, com episódios de falta de memória e grande dificuldade em escrever (apresentaria a sua última lição em 1862).

Faraday era um experimentalista de génio. Tal como Newton nas suas investigações de Óptica, muito difi-

cilmente seria possível fazer mais ou melhor com os meios experimentais disponíveis. Escreveu Tyndall, em *Fragments of Science* (1896):

Faraday had heard it stated that henceforth physical discoveries would be made solely by the aid of mathematics; that we had our data, and needed only to work deductively. Statements of a similar character crop out from time to time. (...) The tendency of natural science doubtless is to bring all physical phenomena under the dominion of laws, to give them mathematical expression. But our approach to this result is asymptotic; and for ages to come – possibly for all ages of human race – Nature will find room for both the philosophical experimenter and the mathematician. Faraday (the apostle of experiment) entered his protest against the foregoing statement by labelling his investigations “Experimental Researches”.

“Apóstolo da Experimentação”. É assim que Tyndall o designa. Como é sabido, e devido às suas origens humildes (chegou a dormir com os pais e os três irmãos na mesma divisão, e começou a trabalhar aos 13 anos), Faraday pouco sabia de Matemática. No entanto, Maxwell diz sobre ele o seguinte, no seu *Tratado de Electricidade e Magnetismo* (1873):

[Faraday’s] method of conceiving the phenomena was also a mathematical one, though not exhibited in the conventional form of mathematical symbols. (...) For instance, Faraday, in his mind’s eye, saw lines of force traversing all space where the mathematicians saw centres of force attracting at a distance: Faraday saw a medium where they saw nothing but distance.

É a Faraday que se deve o conceito de campo, ainda hoje central em Física (e portanto em Química). Segundo Laidler,⁴ o trabalho de Faraday mereceria seis Prémios Nobel, um em Química (benzeno) e cinco em Física (várias contribuições em electricidade e magnetismo, incluindo a electrólise).

A um nível fenomenológico, pouco há a acrescentar ou a corrigir nos resultados apresentados por Faraday. Uma parte muito interessante é a explicação do brilho da chama pela existên-

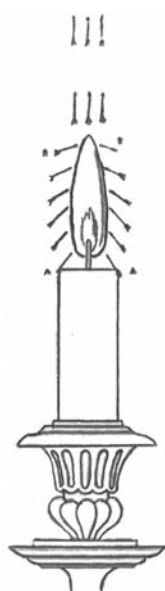
cia de partículas de fuligem incandescentes (que atingem os 1400 °C), cuja presença é demonstrada por Faraday através da sombra da chama, como o fizera Hooke quase duzentos anos antes. Faraday atribui sempre o brilho intenso à presença de partículas sólidas incandescentes, mesmo no caso do fósforo, que não aquece muito, isto é, cuja luz é “fria”: trata-se de facto de luminescência e não de incandescência. VanZee e Kahn⁵ identificaram em 1976 a espécie responsável pela emissão: é o dímero electronicamente excitado (excímero) do monóxido de fósforo, (PO...PO)*. Vem a propósito dizer que Faraday se interessou também pela luminescência (que ainda não se designava assim), tendo dado uma palestra na Royal Institution, em 1859, intitulada *On Phosphorescence, Fluorescence, etc.* Em 1853 Stokes já lá falara sobre a recém-descoberta fluorescência.⁶

Um outro aspecto que se estudou muito depois de Faraday foi a combustão de velas em condições de microgravidade. Faraday refere já a importância da convecção ascendente devida ao aquecimento dos gases pelo calor da chama, e que apenas ocorre na presença de um campo gravitacional (impulsão), como se mostra claramente numa figura contemporânea⁷ (1854). Em microgravidade, o oxigénio é renovado apenas por difusão, não há produção nem transporte de partículas incandescentes, e obtém-se uma pequena chama azul e quase hemisférica, essencialmente devida a quimioluminescência (C₂, CH), tal como se observa nos bicos de gás.



Michael Faraday (1791-1867)

Como se viu, nem todas as demonstrações de Faraday são originais. Desconheço se existe algum estudo sistemático da proveniência destas. Encontrei, por acaso, a experiência das bolas de sabão que, cheias com uma mistura de oxigénio e hidrogénio, explodem ruidosamente em contacto com a chama, no *Manual de Física Divertida* de Fontenelle, datado de 1837 (edição em português, impressa em Paris), sem atribuição a Faraday, o que me levou a investigar a origem desta experiência, também referida no 3º volume do *Curso Elementar de Física e de Química*, de Mouzinho de Albuquerque (Lisboa, 1824), de novo como se fosse bem conhecida. A preparação de bolas de sabão (na altura ditas em inglês *soap-balls*) cheias com



Convecção ascendente⁷

hidrogénio foi feita pela primeira vez por Tiberius Cavallo, que descreve o método em pormenor em *The History and Practice of Aerostation* (Londres, 1785). A experiência original tem pois de ser posterior a esta data, datando provavelmente ainda do século XVIII. Davy poderá tê-la apresentado ao público na Royal Institution, uma vez que a experiência está descrita nas *Conversations on Chemistry* (Londres, 1806), de Jane Marcet, que assistia às lições de Davy. Sabe-se por outro lado, por uma carta de Faraday, que foi pelo livro de Marcet que ele primeiro aprendeu química. E Faraday foi não só espectador atento de Davy, como seu assistente.

Mas *A História Química de uma Vela* está incompleta sem a realização das respectivas experiências. Ler apenas o livro, escassamente ilustrado, é quase como estar diante de um televisor com som mas sem imagem, é ouvir Faraday mas não o ver. Felizmente, o Dr. Sérgio Rodrigues e a Filipa Oliveira, do Museu de Ciência da Universidade de Coimbra, têm apresentado, em conjunto e por diversas vezes, uma selecção das demonstrações. Um *clip* da Universidade de Coimbra, que pode ser encontrado no *YouTube*, pesquisando-se com a frase-chave “A História Química de uma Vela”, é um pequeno aperitivo do que tem sido esse extraordinário espectáculo químico. Espero que venha ainda a ser integralmente filmado e gravado. Será ainda verdade, como afirmava Faraday, na introdução do livro, que

«nenhum caminho é mais aberto, nem nos conduz melhor ao estudo da Filosofia Natural, que o estudo dos fenómenos físicos de uma vela»? Talvez já não,⁸ mas é certamente um passeio que se faz com muito prazer e proveito, na companhia de um dos maiores cientistas de todos os tempos.

NOTAS

¹ Vejam-se por exemplo R. A. Hasty, *Spectrum* **16**(1) (1978) 23, e J. P. Birk, A. E. Lawson, *J. Chem. Educ.* **76** (1999) 914.

² Note-se no entanto que a indicação da potência consumida pelas lâmpadas, expressa em watt, deve, por força de uma directiva da União Europeia, ser acompanhada também pela indicação do fluxo luminoso (poder iluminante), expresso em lumen, unidade definida a partir da candelila, talvez a mais bizarra unidade de base do SI, e que corresponde aproximadamente ao poder iluminante de uma vela, numa certa direcção.

³ Já depois da publicação da tradução portuguesa, saiu uma nova edição em inglês, com uma extensa introdução escrita por Frank James (Oxford U.P., 2011), onde a tradução portuguesa é referida como um dos raros casos em que “Hooker” é correctamente identificado com Hooke.

⁴ K. J. Laidler, *To Light Such a Candle*, Oxford University Press, Oxford (1998).

⁵ R. J. VanZee, A. U. Kahn, *J. Chem. Phys.* **65** (1976) 1764.

⁶ B. Valeur, M. N. Berberan-Santos, *J. Chem. Educ.* **88** (2011) 731.

⁷ D. Lardner, *The Museum of Science and Art*, vol. 2, Walton and Maberly, Londres (1854).

⁸ A utilidade pedagógica das demonstrações é discutida por M. Walker, M. Gröger, K. Schlüter, B. Mosler, *J. Chem. Educ.* **85** (2008) 59.



ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

CEGUEIRA NOCTURNA ASSOCIADA A DEFICIÊNCIA DE MINERAIS

Investigadores do National Center of Excellence in Analytical Chemistry, Universidade de Sindh, no Paquistão, utilizaram a espectrometria de absorção atómica com atomização por chama para testar amostras biológicas (cabelo, soro, sangue e urina) provenientes de crianças com cegueira noturna. Esta patologia é causada por deficiência em vitamina A e neste estudo foi demonstrada a deficiência concomitante em vários minerais (magnésio, cálcio

e potássio), assim como a presença de elevados níveis de sódio, quando comparados com o controlo efectuado com base em crianças saudáveis.

Este estudo coloca em evidência que a cegueira noturna pode reflectir um mau estado nutricional geral, podendo fornecer indicações adicionais aos profissionais de saúde em regiões onde ocorre esta patologia. Mais detalhes podem ser consultados

em <http://www.spectroscopynow.com/coi/cda/detail.cda?id=26264&type=Feature&chId=1&page=1>.

(adaptado de http://www.chemweb.com/content/alchemist/alchemist_20111028.html)

Marcela Segundo

(msegundo@ff.up.pt)

Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto

MÁRIO NUNO BERBERAN E SANTOS PRESIDENTE DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

ENTREVISTA CONDUZIDA POR
HELDER GOMES E CARLOS BALEIZÃO



Ao publicar o número de Outubro-Dezembro 2011 do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, o último em distribuição no Ano Internacional da Química e coincidente com a celebração do Centenário da SPQ (foi precisamente no dia 28 de Dezembro de 1911 que a SPQ foi fundada), quisemos falar com o Professor Mário Nuno Berberan e Santos, actual Presidente da SPQ, para dar a conhecer melhor os projectos da nossa Sociedade. Nesta entrevista falamos um pouco sobre o passado, mas principalmente sobre o futuro da SPQ e o papel da Química nos novos desafios que o mundo enfrenta.

BQ: Obrigado por ter aceite o nosso convite para esta entrevista. Não é todos os dias que se comemora um centésimo aniversário. Como se sente por ser o Presidente da SPQ no ano do seu centenário?

BS: Sinto-me honrado, não só pela confiança que mereci aos sócios, delegando em mim a sua representação, mas também ao pensar em todos os químicos distintos que me precederam no cargo, começando por Ferreira da Silva, e continuando em tantos outros, dos quais alguns felizmente vivos e activos. Sinto-me ainda levado a fazer um balanço da SPQ, em conjunto com todos os sócios, e em especial os da Direcção, olhando para o passado mas também pensando no futuro.

BQ: Que impacto espera que esta celebração possa ter na imagem da SPQ?

BS: Algum impacto terá, sobretudo na sua projecção externa. Ainda há pouco estivemos presentes no Café de Ciência que anualmente se realiza na Assembleia da República, este ano dedicado à Química. E em várias outras assembleias e meios de comunicação (incluindo a televisão) foi e vai sendo

assinalado o nosso centenário. É importante que se saiba da existência da SPQ e das sociedades científicas em geral, entidades sem fins lucrativos e devotadas ao bem comum, nas respectivas áreas de actuação. Mas, como acontece com as pessoas, mais do que a imagem, por vezes falsa ou distorcida – e quantas máscaras não têm caído nestes últimos tempos? – o que para nós deve contar em primeiro lugar é o que a SPQ efectivamente representa e faz.

BQ: A comemoração do Centenário da SPQ coincidiu com a realização do Ano Internacional da Química. Como interpreta esta coincidência, uma oportunidade para dar um destaque ainda maior à SPQ, ou preferia que os eventos tivessem sido realizados em anos diferentes para prolongar o destaque dado à Química, que, no presente caso, fica essencialmente concentrado no ano de 2011?

BS: Não é bem assim, pois como a SPQ foi fundada em 28 de Dezembro de 1911, as comemorações do centenário irão prosseguir durante todo o ano de 2012. Mas começámos as celebrações uns meses antes precisamente para aproveitar a coincidência parcial com o Ano Internacional da

Química. Já agora, o logotipo do AIQ em várias línguas (inglês, francês, italiano, alemão, ...) remete para a casa do elemento carbono na Tabela Periódica, mas por causa do ano em que se celebra o AIQ, ficou carbono-11, isótopo extremamente instável, durando muito menos de doze meses. Neste aspecto, 2012 teria sido melhor escolha para o AIQ! Fica a consolação de podermos pensar em Marie Curie.

BQ: Há mais de 25 anos que colabora activamente na dinamização das actividades da SPQ, seja como membro da equipa do Boletim, como seu Director, como membro do Conselho Executivo, do Conselho Directivo e agora como Presidente da SPQ. Como viu a evolução da SPQ nestes últimos 25 anos?

BS: É verdade, comecei em 1985 no Boletim. Depois disso estive desligado de participações activas por três vezes, durante um total de 9 anos. Nos restantes 16, e em particular nos últimos 5, colaborei sempre com a SPQ, de uma maneira ou de outra. Não posso fugir a responsabilidades, para o bem e para o mal... Quanto a uma perspectiva sobre esse último quarto de século da SPQ, julgo que, de um modo geral, a SPQ tem repre-

sentado e espelhado de forma satisfatória a Química e os químicos de Portugal nas suas várias vertentes, em especial investigação e ensino, pois a indústria tem outros meios e também outras associações. A evolução foi muito positiva, e a SPQ é hoje uma sociedade científica mais sólida e diversificada do que há 25 anos. Temos uma dimensão e uma estrutura que ombreia com as das outras sociedades europeias (pelo menos), desde que vista na devida proporção demográfica, científica e industrial, e tendo em conta que não temos a vertente profissional (como é o caso da RSC, que por essa razão se destaca de todas as outras).

BQ: Uma actividade muito relevante que a SPQ tem dinamizado é a realização das Olimpíadas de Química, que ano após ano, tem visto o número de participantes aumentar. Fruto desse trabalho, os nossos representantes portugueses nas Olimpíadas Internacionais de Química e na Olimpíada Ibero-americana de Química têm conseguido classificações cada vez mais elevadas. Exemplos disso são a Menção Honrosa conseguida nas Olimpíadas Internacionais de 2010 e as 3 medalhas conseguidas recentemente na Olimpíada Ibero-americana de Química. Como analisa esta evolução dos nossos estudantes na perspectiva da sua motivação para o estudo da Química?

BS: As Olimpíadas de Química são muito importantes para a promoção da Química junto dos nossos estudantes dos Ensinos Básico e Secundário, e é muito bom ver que se têm expandido bastante, sempre com o apoio financeiro do Ministério da Educação e a participação voluntária e desinteressada de muitos professores do ensino não superior e de vários sócios da SPQ. Foi quando era Secretário-Geral que se iniciou a nossa participação na Olimpíada Internacional de Química (International Chemistry Olympiad), destinada a alunos finalistas do Ensino Secundário. Havia quem dissesse que não valia a pena, que nos ficássemos pelas Ibero-Americanas... Acompanhei também a primeira delegação nacional (com a Prof. Diana Pinto, da Universidade de Aveiro) à competição, que nesse ano se realizou em Atenas, e por isso relativizei um pouco o significado dos prémios.

É um caso em que a participação é de facto muito mais importante do que as medalhas. Claro que foi bom termos conseguido a Menção, mas não considero que seja um falhanço quando se não obtêm distinções, desde que os resultados correspondam ao exigível. Em primeiro lugar, as pontuações resultam muito da preparação especial para a Olimpíada que cada país ministra aos seus estudantes, preparação que não é controlada pela organização. Com efeito, uma parte das matérias teóricas e laboratoriais está ao nível do primeiro ano universitário. Nós fazemos essa preparação dentro do possível e das regras, com o grande apoio da Universidade de Aveiro, e de várias outras universidades de todo o país. Em segundo lugar, e este é um aspecto que os nossos órgãos de comunicação ignoram, as medalhas, mesmo as de ouro, não são atribuídas a um só concorrente, como acontece nas competições desportivas, mas sim a todos os que tenham obtido classificações num certo intervalo. Só assim se pode satisfazer simultaneamente a vaidade de vários países! Ora os prémios que os alunos medalhados recebem em certos países são muito consideráveis, por exemplo bolsas de estudo, o que é um estímulo muito poderoso para a sua preparação intensiva. Por estas e por outras razões que não mencionarei, os resultados obtidos não traduzem directamente a qualidade, profundidade e extensão do ensino da química num dado país, embora seja óbvio que se estas forem globalmente más as classificações dificilmente o não serão também.

BQ: Estes resultados aparecem em contraciclo com a perda de peso da Química no Ensino Secundário, principalmente ao nível do 12º ano. E este ano, alguns cursos de Química não preencheram as vagas todas, mesmo após a 2ª fase de candidatura ao ensino superior. Como interpreta estes dados?

BS: Parece claro que a organização e os programas do Ensino Secundário precisam de revisão (mais uma!). Também a Matemática, como é sabido, funciona como um primeiro filtro, embora já nem seja pedida por muitos cursos. A procura destes, principalmente numa altura de crise económica, é em grande parte de-

terminada pela empregabilidade dos mesmos, real ou imaginária, pois é parâmetro difícil de precisar num horizonte de vários anos, que são os que medeiam entre a entrada na universidade e a saída com a licenciatura, o mestrado ou o doutoramento. Dada a natureza dos cursos científicos e tecnológicos, o estrangeiro será também sempre uma possibilidade, embora para muitos isso seja indesejado, e não constitua o melhor resultado directo para o país, quando a saída é irreversível. Neste último caso poderá contudo ser, mesmo assim, em benefício próprio e da humanidade, pois o número de cientistas e engenheiros, a nível mundial, é reduzido. A fusão de instituições está na ordem do dia, e haverá certamente redundâncias a eliminar, mas o nosso governo deveria também estudar melhor a possibilidade de o ensino superior português participar activamente na cooperação com os países de língua portuguesa, cujas populações e necessidades de formação têm crescido enormemente. Algumas universidades começam a enveredar por este caminho, em que há uma complementaridade evidente.

BQ: Que mensagem e conselhos pode transmitir aos jovens que gostariam de enveredar por uma carreira académica ou científica na área da Química?

BS: Três ideias: 1) Que a Química está na sua infância, havendo muito, muitíssimo mais para descobrir, criar – incluindo sintetizar – e inventar do que o que já é conhecido. 2) Que a primeira motivação e recompensa está dentro de nós, no prazer intelectual de conhecer e de descobrir, e não no reconhecimento pelos outros, ou no serviço aos outros, que são resultados prováveis mas incertos, e muitas vezes retardados. 3) Que antes de comunicarmos aos outros os nossos novos resultados, teóricos ou experimentais, nos devemos convencer a nós próprios, não confundindo desejo com realidade, pelo que quanto mais exigentes formos, melhor.

BQ: A SPQ faz parte do consórcio editorial de revistas europeias ChemPubSoc Europe, que integra 14 Sociedades de 13 países diferentes. Quais são as mais valias para a SPQ em pertencer a este consórcio?

BS: Trata-se de um consórcio editorial de sociedades científicas e de uma grande editora, a Wiley-Blackwell, resultante da intenção de criar revistas europeias de Química, em alternativa às tradicionais revistas nacionais, muitas das quais, embora prestigiadas, estavam em declínio, pois eram editadas por sociedades científicas de pequena dimensão e não por editoras profissionais com as quais competiam. A própria sociedade de química alemã tinha alienado a sua editora, que ainda conserva memória desse passado, mas está agora integrada no grupo mencionado, muito mais vasto, e de base anglo-saxónica. A única sociedade europeia de dimensão significativa (é mesmo a maior de todas) que, por vontade própria, ficou fora do consórcio, foi a Royal Society of Chemistry. As razões da nossa participação são essencialmente duas: em primeiro lugar, ocupar o lugar que é nosso na Europa, e até com vantagem, pois temos uma dimensão média dentro do consórcio; em segundo lugar, os proventos financeiros que advêm de pertencermos ao consórcio.

BQ: Durante o seu mandato como Presidente da SPQ, uma das decisões mais importantes que foram tomadas foi a aquisição de mais 3% da quota da revista Chemistry – A European Journal. Qual a importância desta aquisição para a Sociedade Portuguesa de Química?

BS: O acordo celebrado para esta revista aquando da sua criação prevê que as sociedades possam deter até 10% da quota, embora a maioria tenha bastante menos. Portugal e Espanha entraram ao mesmo tempo, com 5% cada. Como os lucros são distribuídos em função das quotas e do número de artigos, e tendo nós um número pequeno de artigos, facilmente se vê o interesse de termos uma maior quota. Claro que foi um investimento importante, mas um investimento em Química, na melhor revista do consórcio, cujo impacto e lucros (que serão sempre em euros) têm aumentado bastante. É de prever que a actual instabilidade económica da Europa afecte em alguma coisa os resultados, por exemplo a conversão dólar/euro é importante (parte das assinaturas são pagas em dólares), mas

não são de esperar quedas abruptas, e as revistas de acesso livre (Open Access) continuam a não ser competitivas. Ao aumento de 5% para 8% corresponde um aumento dos nossos rendimentos totais com publicações de mais de 30%.

BQ: Fale-nos agora um pouco das actividades organizadas pela SPQ que se destacaram mais no âmbito das comemorações do Ano Internacional da Química e do Centenário da Sociedade...

BS: A SPQ tem funcionado como centro de recolha e de divulgação de actividades, através de contactos múltiplos e de um site próprio, para além da informação veiculada na nossa Newsletter e no Química. É essa a principal função da SPQ neste AIQ. Dentro das suas possibilidades também tem apoiado financeiramente várias iniciativas, desde livros a espectáculos culturais (bailado, música, teatro...). Quanto a iniciativas próprias, quero destacar a edição de pins e cartazes temáticos, de um concurso destinado ao ensino secundário, e a digitalização e colocação on-line, em acesso livre, de todas as publicações da SPQ, iniciadas como se sabe com a Revista de Química Pura e Aplicada.

BQ: O ponto alto das comemorações foi a realização do XXII Encontro Nacional em Braga, que reuniu cerca de 600 participantes, um dos encontros mais participados de sempre, num modelo inovador, que aliou a realização do Encontro Nacional com a realização de seis encontros sectoriais. Como viu este modelo de organização? Será para repetir?

BS: O Encontro, que foi muito participado, como dizem, funcionou bem e teve o melhor programa social e cultural de sempre. Mas as várias divisões e grupos têm grande liberdade na organização dos seus encontros, pelo que a decisão final será sempre sua, tendo naturalmente em conta as expectativas de participação e de resultados, e a conjuntura económica.

BQ: As comemorações do Centenário da SPQ ainda se irão prolongar pelo ano de 2012. Que realizações estão previstas que nos possa desvendar?

BS: Iremos ter uma sessão comemorativa da primeira reunião da SPQ, e também iremos receber o consórcio ChemPubSoc Europe em Lisboa, na sua reunião anual, entre outras realizações. O plano de edições também irá prosseguir, desde já com a tradução do Tratado Elementar de Química, de Lavoisier (1789).

BQ: De que modo a crise económica e financeira que o mundo está a atravessar tem dificultado as actividades da SPQ?

BS: Até aqui as dificuldades foram suportáveis, embora os apoios financeiros para o AIQ tenham sido quase nulos, por exemplo. Também a FCT deixou de subsidiar a SPQ no ano do seu centenário, o que não deixa de ser irónico. Fomos levados a fazer uma primeira contenção de custos, tendo ao mesmo tempo reduzido o valor das quotas em 5%. Escuso de dizer que as condições económicas e sociais estão a piorar muito, numa extensão e com consequências por enquanto difíceis de discernir, mas sem dúvida negativas para a Ciência em Portugal, e portanto negativas para a SPQ. Também a convergência científica com os países mais desenvolvidos que, bem ou mal, estávamos a conseguir, num esforço iniciado há várias décadas, começa a estar em risco, tanto mais que a evolução da Ciência, a nível global, é impressionante e não está a abrandar. Suponho no entanto que conseguiremos suportar este período menos bom, desde que não ultrapasse alguns anos.

BQ: Quais os principais projectos que gostaria de ver concretizados no futuro próximo da SPQ?

BS: Uma sede em bases mais sólidas. A actual é alugada, em conjunto com outras três sociedades, e os custos poderão vir a ser difíceis de suportar para alguns de nós. Também o reconhecimento da utilidade pública da SPQ, processo que se tem arrastado, não por culpa nossa, e cuja história se divulgará um dia.

BQ: Como perspectiva a evolução futura da Química? Quais os novos desafios que o mundo enfrenta e qual o papel da química na resolução dos mesmos?

BS: Citando Vítor Hugo, “o futuro é um fantasma que tudo promete e nada tem”. Apenas podemos antever alguns aspectos da evolução próxima, e ainda assim de forma imprecisa. Mas é sempre bom tentá-lo. A evolução da Química basear-se-á sempre em novas moléculas, novos sistemas supramoleculares (incluindo a “vida artificial”), novos materiais, novas reacções, e novos métodos de análise. Como disse Jean-Marie Lehn, “a Química não é apenas um livro já escrito e que se vai lendo aos poucos, é um livro que se está a escrever!” As áreas onde o impacto continuará a ser grande serão a saúde (higiene, diagnóstico, biomateriais, terapias), a alimentação (agroquímica, água, química alimentar), o ambiente (alterações climáticas, atmosfera, águas e solos), a indústria (química verde, biotecnologia), e a energia (armazenamento e conversão). O grande desafio é o crescimento populacional, que irá prosseguir ainda durante décadas, e com ele não só as aplicações, mas também a investigação e o ensino. Todos os que nascem têm o direito de aprender, podendo depois vir a contribuir para o bem-estar comum de acordo com as suas capacidades.

Não é isso que infelizmente acontece. Por exemplo, o continente que maior crescimento populacional apresenta, a África, só muito marginalmente intervém na ciência mundial. Vemos pelos indicadores bibliométricos que acontece o mesmo com grande parte da humanidade, uma humanidade em que a Europa tem cada vez menor peso demográfico.

BQ: O Professor Berberan e Santos é conhecido como o orquestrador de uma grande mudança no Boletim da SPQ, que em 1992, após quase um ano de interrupção, surgiu com novo formato e novo nome: QUÍMICA. Como vê a evolução do QUÍMICA desde esses tempos?

BS: Foi uma grande evolução, e o QUÍMICA atravessa um bom momento. Um marco importante foi o início da versão on-line. Não será de excluir que no futuro se dê uma passagem total ou quase, para a edição electrónica. É assunto a ponderar.

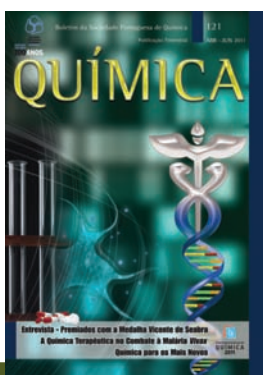
BQ: A entrevista chegou ao fim, obrigado pelo tempo disponibilizado.

BS: Eu também agradeço o interesse e a ideia.

NOTA BIOGRÁFICA DO PROFESSOR MÁRIO NUNO BERBERAN E SANTOS

Mário Nuno de Matos Sequeira Berberan e Santos é licenciado em Engenharia Química e doutorado em Química pelo Instituto Superior Técnico, tendo efectuado o seu pós-doutoramento em Paris (CNAM e Univ. de Paris-Sud). É professor catedrático de Química-Física no IST, e foi professor catedrático convidado da École Normale Supérieure de Cachan (França). É investigador do Centro de Química Física Molecular (IST), sendo autor ou co-autor de cerca de 200 publicações, incluindo 150 artigos em periódicos internacionais e dezena e meia de capítulos em livros. É autor, com Bernard Valeur, de “Molecular Fluorescence. Principles and Applications” (Wiley-VCH, 2012). É membro do Conselho Editorial das revistas científicas ChemPhysChem – A European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry, e MATCH – Communications in Mathematical and Computer Chemistry. Foi eleito Fellow da Royal Society of Chemistry (Reino Unido) em 2004. Recebeu em 2006 o prémio “Estímulo à Excelência” da Fundação para a Ciência e a Tecnologia.

Sociedade Portuguesa de Química



Química - Boletim da Sociedade Portuguesa de Química
A Química ao seu serviço

100 ANOS DA QUÍMICA EM PORTUGAL SOB OS AUSPÍCIOS DA SPQ

Parte I. O papel do Congresso de Karlsruhe de 1860 na estruturação da Química como uma ciência moderna

AUGUSTO CORREIA CARDOSO E SEBASTIÃO J. FORMOSINHO*

A ciência, para além de ser uma actividade intelectual e uma prática, é também uma actividade social. Neste referente, a Química desempenhou um papel pioneiro na organização da ciência, pois é a primeira disciplina a pôr em marcha um Congresso Internacional. Perante as divergências existentes sobre o atomismo, o congresso surgiu para fomentar a comunicação e procurar consensos entre os químicos, o que, não tendo sido alcançado no imediato, veio a produzir efeitos duradouros sobre conceitos básicos da estrutura atómica e molecular. Através de um conjunto de livros de texto publicados entre 1850 e 1871, verifica-se que a Universidade Portuguesa acompanhou bem este enorme progresso para o ensino da Química.

A Química como ciência moderna e independente é indubitavelmente uma ciência europeia. Os anos da fundação das sociedades de química correspondem, em larga medida, ao grau de evolução da ciência química a nível das universidades, escolas politécnicas e academias e da industrialização nos diferentes países europeus. Na obra “*Creating Networks in Chemistry. The Founding and Early History of Chemical Societies in Europe*” [1], editada por Anita Kildebaek e Soňa Štrbáňová, verifica-se ser longo o arco temporal desta criação, desde 1841 (Grã-Bretanha) até 1919 (Polónia) [2]. Carece-se pois de enquadrar o nascimento da *Sociedade Chimica Portuguesa* em 1911 no panorama da química europeia, o que nos obriga a recuar até ao século XVIII e, respeitando os critérios editoriais de *QUÍMICA*, o *Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, apresentar este trabalho em quatro partes: as primeiras dizem respeito aos primórdios do nascimento e da organização profissional da química moderna nos séculos XVIII e XIX e ao papel da universidade de Coimbra neste percurso da química nacional; a terceira e a quarta debruçar-se-ão sobre o papel das escolas politécnicas neste mesmo caminho e sobre a internacionalização da química portuguesa até ao presente.

OS PRIMÓDIOS DE INDEPENDÊNCIA E MODERNIDADE NA QUÍMICA

Para que um conjunto de factos experimentais e de práticas possa ser considerado como ciência, tem de ser informado por ideias, o que torna a actividade científica uma actividade intelectual. Nas Ciências da Natureza, tais ideias têm de ser passíveis de um teste empírico. Logo, o que se torna relevante são as *práticas de investigação* – estratégias de investigação, utensílios mentais e experimentais. Vai privilegiar-se assim a *finalidade cognitiva* da ciência. No caso da Química, que veio de um passado obscuro de tradições artesanais e de alquimia, com a sua dimensão secreta, mística e mágica, a porta da *modernidade* foi entreaberta por Robert Boyle com a capacidade de reprodução experimental, pois parece ter sido o primeiro a apresentar as suas observações experimentais sem “cozinhar” os resultados [3]. Acresce que os seus estudos eram guiados por uma teoria, o que o faz um verdadeiro «homem de ciência», e a lei da relação entre a pressão e o volume (lei de Boyle) nos seus estudos dos gases, como reconhece Jorge Calado, constitui um marco importante: a *matematização da química* [4]. Um nascimento prematuro da química-física.

Os trabalhos de Boyle foram muito importantes para a química, porque os seus escritos tornaram esta ciência nascente muito atractiva, como parte

de uma nova «filosofia natural», e não só para ser manipulada por farmacêuticos ou metalúrgicos. Era uma filosofia baseada num grande princípio unificador – a *visão mecânica do mundo*. Um mundo constituído por corpúsculos que actuavam por puxões e empurrões. A química do século XVII passou a ser uma “ciência mecânica” demasiado próximo da física. Mas a química carecia ainda de percorrer um longo caminho até alcançar uma teoria atómica coerente. Transcorre precisamente no Ano Internacional da Química, que estamos a celebrar, conjuntamente com o centenário da fundação da nossa sociedade de química, mais uma data marcante, os 350 anos da publicação de *The Sceptical Chymist*, por Boyle.

A busca de autonomia passou pelo surgimento na Alemanha da primeira teoria específica da química, entre 1703 e 1731: uma teoria de um princípio da inflamabilidade, a “teoria do flogisto” de Georg Stahl, com base em ideias mais antigas (1667) de Johann Becker. Como referiu Simões de Carvalho:

«Stahl, tinha imaginado para explicar este fenómeno [a combustão], a existencia d’um principio particular, a que dera o nome de phlogistico; mas isso não era mais do que um esforço do genio, luctando com as trevas da ignorancia em busca de uma idéa luminosa, que abraçasse todos os factos e formasse um corpo de doutrina» [5].

* Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Rua Larga 3004-535 Coimbra, E-mail: sformosinho@qui.uc.pt

Porém, já no século XVIII, a química torna-se verdadeiramente numa “ciência independente” com Antoine Lavoisier. Este cientista produziu uma ruptura com a visão física de uma teoria corpuscular proposta por Boyle – temos de fundar esta ciência sobre aquilo que podemos saber, os *elementos*, e não sobre aquilo que não podemos saber, os *átomos* –, mas especialmente produzir uma ruptura definitiva com a perspectiva de um princípio “imponderável” de Stahl. Assim, veio a conferir à química um carácter quantitativo com base na balança [6]. Quem, como Althusser, vê a história como «um processo sem sujeito», então «Lavoisier não representa nada, é a balança que representa tudo, que o autoriza a falar». «A balança é então ao mesmo tempo o instrumento privilegiado do laboratório do químico, um conceito organizador que permite abstrair de certas circunstâncias, e um instrumento de argumentação que cria um palco de prova» [7].

A química independente do século XVIII surge já como uma química conquistadora que, por diversas vias, reivindica a dignidade e a legitimidade de uma ciência. No século XIX surge a *química académica e profissional*. Na França do séc. XIX, o grande iniciador de uma «escola de investigação» foi Claude Louis Berthollet e o seu mais eminente estudante Gay-Lussac [8]. Berthollet arranhou empregos para Gay-Lussac, que foi o primeiro químico a viver da sua profissão. Passou a ser comum no seio dos professores universitários a atitude de encontrar uma colocação para os seus discípulos.

Ainda no século XIX, e subsequentemente no século XX, os territórios da química vão ser cada vez mais de *perfil industrial*, no mundo da produção e do trabalho. Por fim, marcadamente após a 2ª Grande Guerra, vai surgir a química desagregada em disciplinas, como uma *ciência central* e uma *ciência de serviço*. O carácter utilitário da ciência, e mormente da química, é bem notório, porque a química lida com as *transformações da matéria*, ou indo um pouco mais longe na profundidade dos conceitos, com “transmutações”.

O ANO DE 1860 PARA A QUÍMICA

O “Ano Internacional da Química” foi lançado pela UNESCO em 2011: “*The year 2011, the 100th anniversary of the award of the Nobel Prize in chemistry to Mme Maria Curie, will also provide an opportunity to celebrate the contribution of woman to science. The year also marks the 100th anniversary of the founding of the International Association of Chemical Societies (IACS), which was succeeded by IUPAC a few years later*”. Mas em 2010 perfez-se 150 anos de um «ano de ouro da Química»: 1860. Em Janeiro, Louis Pasteur, a pedido da Academia das Ciências de Paris, profere duas conferências sob o tema *Assimetria Molecular de Substâncias Orgânicas Naturais [Molecular Asymmetry of Natural Organic Substances]*. Estas conferências lançaram os alicerces para o trabalho posterior da relação entre a actividade óptica e a estrutura molecular, conduzindo, em 1874, às hipóteses independentes, de Jacobus H. van't Hoff (1º Prémio Nobel de Química) e de Joseph A. Le Bell, do carbono assimétrico. Em Maio desse ano, Robert Bunsen comunica à Academia de Ciências de Berlim a descoberta do quarto metal alcalino, o céσιο. Esta descoberta vai marcar o início de um novo domínio da análise química, a análise espectroscópica. Em 3 de Setembro, durante três dias, inicia-se o Congresso de Karlsruhe.

Neste recuo de 151 anos ao Ano Internacional da Química, curemos um pouco de mais de alguns destes marcos, reservando considerações mais pormenorizadas sobre o congresso de Karlsruhe, pelo que representa para toda a evolução da ciência. É que as controvérsias sobre o atomismo no século XIX, e a sua resolução iniciada em Karlsruhe, desempenharam um importante papel na consolidação do conceito de átomo e de molécula na Física e Química do século XX, com consequências únicas para toda e qualquer ciência.

A QUÍMICA FÍSICA vai requerer a utilização de métodos físicos na investigação em química. O primeiro passo, e que grande passada nesse sentido, surge com a invenção da espectros-

copia em 1859. Como expressão impar da relevância desta nova metodologia, os seus inventores foram logo contemplados nos anos seguintes, 1860 e 1861, com a descoberta de novos elementos pouco abundantes na crosta terrestre, respectivamente o céσιο (3 ppm) e o rubídio (14 ppm).

A espectroscopia foi fruto de um acontecimento raro na época, a colaboração de um químico, Robert Bunsen, e um físico, Gustave Kirchoff. No meio das suas vidas cruzaram-se duas vezes, a primeira em Breslau e depois na Universidade de Heidelberg. Aqui tornaram-se amigos pessoais, quase inseparáveis. Eram acostumados nas ruas de Heidelberg, em conversação científica profunda, enquanto caminhavam juntos. Terá sido num desses passeios, que a observação de um pôr de sol visto das alturas arborizadas de Heidelberg os terá levado a encarar a análise espectral. A motivação de Bunsen, com enorme talento experimentalista, era a interpretação da cor dada à chama por diversos sais, fenómeno já conhecido desde 1758, ano em que Andreas Sigismund Marggraf (1709-1782) havia notado as cores que os sais de sódio e de potássio conferiam à chama. Tema posteriormente desenvolvido por Talbot e Herschel em 1826. Já a motivação de Kirchoff, mais teórico do que experimentalista, era outra, a da interpretação das riscas do espectro solar descobertas em 1832 por Fraunhofer [9], que culminou, em 1860, com a publicação *Chemische Analyse durch Spektralbeobachtung* [Chemical Analysis through spectral observations], amplamente baseado em experiências realizadas pelo Bunsen [*Annalen der Physik und der Chemie* (Poggendorff), Vol. 110 (1860) pp. 161-189].

Em 2003, os cientistas e historiadores americanos elegeram «As mais belas experiências» em química [10]. A primeira é de Louis Pasteur, a separação de cristais de enantiómeros – isómeros ópticos – fruto da cristalização, a temperaturas inferiores a 28°C, de um sal de ácido tartárico. Em 1836, Mitscherlich havia investigado a actividade óptica dos sais de dois tartaratos, o ácido tartárico normal, que era opticamente activo, e o ácido racémico (assim o denominou Gay-Lussac) ou

para-tartárico, que aparecia misturado com o normal sob a forma de pequenas agulhas brancas, mas não era opticamente activo.

Em 1848, Pasteur preparou e cristalizou dezanove sais de ácido tartárico, e separou-os com o auxílio de uma lente de aumento e de umas pinças, conseguindo orientá-los segundo as suas faces assimétricas, umas inclinadas para a direita, outras para a esquerda. Posteriormente, demonstrou que as duas formas cristalinas possuíam a propriedade de rodar o plano de polarização da luz polarizada em direcções opostas, e abriu um campo de grande importância em química orgânica e em bioquímica. A luz é uma onda em que vibram os seus dois campos, um eléctrico e outro magnético. Na luz normal, tais campos vibram em todas as direcções mas, recorrendo a polaróides ou cristais de quartzo, consegue-se que a luz só tenha um plano de vibração, a luz polarizada. Ora, a inactividade óptica do ácido racémico era fruto de ser uma mistura, em partes iguais, dos dois tipos de cristais [11]. Como refere Jorge Calado, Pasteur teve sorte, não só porque são muito poucas as substâncias que ao cristalizarem se separam espontaneamente em cristais dos dois tipos, como pelo facto de com o ácido tartárico esta separação ocorrer num intervalo estreito de temperaturas; no Verão, acima de 35 °C não teria descoberto a *enantiometria* [12].

Em 1860, Pasteur veio mesmo a admitir existir uma relação entre uma estrutura microscópica de hélices direita e esquerda, diríamos hoje configuração molecular, e actividade óptica. Nesse tempo ainda não era consensual o conceito de “molécula”, que só veio a emergir depois do congresso de Karlsruhe.

As nossas mãos são objectos simétricos que não se sobrepõem; estão uma para a outra como um objecto para a sua imagem num espelho plano. Topologicamente temos de considerar na sua orientação espacial quatro elementos diferentes: o polegar, o mindinho, as costas e a palma das mãos. Em 1874, e de modo independente, van't Hoff e Le Bell atribuíram a existência de *isómeros ópticos* a certas propriedades de orientação es-

pacial de grupos moleculares à volta de um átomo de carbono. Tais grupos distribuem-se espacialmente segundo os vértices de um tetraedro e criam uma topologia de simetria como a das nossas mãos. Tal só se consegue se os quatro grupos moleculares forem todos diferentes entre si, e assim se cria um centro *quiral* (do grego *cheir* que significa “mão”), como no caso do ácido tartárico.

A existência de substâncias que são isómeros ópticos e que Pasteur isolou sob a forma de cristais (macroscópicos), corresponde, a nível microscópico, a moléculas com um ou mais centros *quirais*. A quiralidade tem grande importância em bioquímica; por vezes, um isómero óptico tem sabor e o outro não. A explicação de todo o tipo de *isomeria* – a mesma fórmula molecular mas a existência de substâncias com propriedades diferentes –, incluindo a óptica, foi um dos grandes triunfos da química do século XIX, que se deve, em muito, aos químicos terem acreditado na existência real das moléculas.

Não conseguimos ver os átomos e as moléculas, mesmo com os instrumentos ópticos mais sofisticados dos séculos XVIII e XIX, microscópios e ultra microscópio. A beleza da experiência de Louis Pasteur é que visualiza a nível macroscópico, algo que tem uma profunda marca de estrutura a um nível microscópico, uma *configuração molecular*.

O CONGRESSO DE KARLSRUHE DE 1860

Neste breve enquadramento histórico devemos ver a ciência como uma actividade intelectual, como uma prática e como uma actividade social. Ora neste último sentido, a química desempenhou um papel pioneiro na organização da ciência, pois, como referimos, há 150 anos é a primeira disciplina a pôr em marcha um Congresso Internacional. Foram convidados 45 participantes, tendo assistido 20 destes convidados, e no total estiveram presentes 127 químicos oriundos de 11 países europeus e um do México; o congresso teve lugar, de 3 a 5 de Setembro de 1860, em Karlsruhe, no edifício do Parlamento [“*Ständehaus*”] com a presença de nomes muito so-

nantes da química do tempo. «Concretiza a existência de uma comunidade química internacional e define as regras do seu funcionamento: *comunicação* e necessidade de *consenso*. Por outro lado, aborda um problema teórico fundamental, pois o acordo sobre os números e as fórmulas está subordinado a um entendimento sobre as definições dos conceitos de base: átomo, molécula e equivalente» [13]. E ao tempo, a confusão era enorme, mesmo nos casos de substâncias tão simples como a água: H₂O, HO ou H₂O₂. Este congresso constitui, indubitavelmente, «um dos maiores acontecimentos científicos na história da química» [14]. Mendeleev bem o reconheceu em carta escrita em Heidelberg, a 7 de Setembro de 1860, e endereçada a A. A. Voskresenski, seu professor na Universidade de S. Petersburgo: «O Congresso de química que agora acabou em Karlsruhe produziu uma marca tão profunda na história da nossa ciência que me sinto no dever de lhe descrever, mesmo em poucas palavras, todas as sessões do Congresso e os resultados a que chegou» [15].

Mas na circular de convite, como realça Oki, estavam ainda presentes divergências sobre a nomenclatura química mais adequada para ser usada por essa comunidade. Entretanto, uma questão fundamental estava subentendida nas preocupações explicitadas: a utilização dos conceitos de peso atómico ou equivalente químico [16].

Kekulé, Wurtz e Weltzien, este último o mais velho dos três, já com 47 anos, era professor da Escola Politécnica de Karlsruhe, reuniram-se em Paris nos finais de Março de 1860 e decidem convocar um congresso para serem debatidas questões teóricas emergentes numa química em desenvolvimento e procurarem encontrar alguns consensos na comunidade [17]. A força motriz deste congresso, que se desenrolou mais ao modo de uma *workshop* dos tempos de hoje, foi Friedrich August Kekulé, ao tempo professor de química em Ghent, mas o próprio Kekulé reconhece, em carta dirigida a Weltzien, que obterem a ajuda de Wurtz, «a personalidade mais importante», para a organização do congresso, era «meio caminho andado» [15].

A maioria dos participantes tomava uma posição conservadora segundo o dualismo electroquímico de Berzelius, mas um pequeno grupo com Kekulé e Gerhardt favoreciam ideias associadas a uma teoria molecular [18]. Os mais velhos não estiveram presentes, como Liebig, Wöhler, Mitscherlich; A. W. Hoffman foi convidado para ser um dos organizadores, mas declinou o convite e não esteve presente tendo, todavia, enviado os seus estudantes. Weltzien, que pelo seu bom feito se dava com os químicos mais velhos, sabia bem que os seguidores da escola de Gmelin nunca concordariam em fixar pesos atômicos com base em medidas de pressão de vapor ou de medidas físicas e muito menos por votação [19]. Como enfatizou Bous-singault numa das sessões a que presidiu, «não há uma química velha; há, sim, químicos velhos» [15].

Foram abordadas questões do tipo: i) Deve estabelecer-se uma distinção entre “molécula” e “átomo”, de modo que a “molécula” represente a menor partícula de um corpo que pode estar envolvida numa reacção química e que pode ser comparada com outras no que diz respeito às propriedades físicas, enquanto o “átomo” é a menor partícula de um corpo e está contido em moléculas?; ii) Deve passar a utilizar-se o “novo peso” atômico de 12 para o carbono ou deverá manter o “velho peso” de 6? Dumas favoreceu o uso do “novo peso” em química orgânica, mas que se deveria manter o “velho peso” em inorgânica. Cannizzaro, porém, foi fortemente contestatário de uma tal opção e que todos deviam usar o “novo peso”. Não houve votação nesta questão, mas a maioria inclinou-se a favor de Cannizzaro [15].

Embora o congresso tenha terminado sem se ter alcançado a almejada unanimidade, um artigo do italiano Staliso Cannizzaro, o químico que melhor se havia preparado para esta *workshop*, foi distribuído para o final do congresso pelo seu colega Angelo Pavesi (1830–1896), professor de química em Pavia. O artigo havia sido publicado em *Il Nuovo Cimento* em 1858 no vol. VII, e nele se mostrava como Cannizzaro recorria à hipótese de Avogadro para a quantificação da noção de moléculas em gases e con-

tribuía para a distinção entre termos como “átomo”, “molécula”, “equivalente”. Aliás, este era tema a que recorria no seu ensino em Itália [20]. Lothar Meyer leu a separata do artigo de Cannizzaro no seu regresso a Breslau: «Foi como se me tivessem caído escamas dos olhos; a dúvida desapareceu e deu lugar a um sentimento de uma tranquila certeza» [15]. O mesmo se terá verificado com muitos outros químicos e a proposta de Cannizzaro acabou por fazer o seu caminho ao longo do tempo,volvendo Karlsruhe num marco da história da química e da história das ciências.

Neste congresso esteve presente um único químico português, docente na Universidade de Coimbra, o Doutor Mathias de Carvalho (Figura 1) [21, 22]. Este professor da Faculdade de Philosophia da Universidade de Coimbra havia realizado observações meteorológicas no Gabinete de Física antes de empreender a suas viagens científicas pela Europa, que o levaram até Paris. No final de Março de 1858 envia o primeiro relatório sobre a sua visita ao Observatório de Greenwich e ao Observatório Real de Bruxelas, onde aí acabou por participar, a convite de Alphonse Quetelet, nas observações do eclipse solar de 15 de Março do mesmo ano [23]. Para além dos relatórios sobre magnetismo terrestre e meteorologia, Mathias de Carvalho também enviou à Faculdade relatórios sobre metalurgia [24], mas nenhum sobre a sua participação em Karlsruhe.

Retomemos o curso dos trabalhos do “primeiro congresso internacional” de Química. O congresso de Karlsruhe foi o primeiro congresso de profissionais de uma disciplina científica, a que se seguiu, 20 anos depois, uma série de outros já com regularidade: em 1867 (Paris), 1872 (Moscou), 1873 (Viena), 1876 (Filadélfia), 1878 (Paris) e 1880 (Dusseldorf) [18]. Bem antes de Karlsruhe, membros de sociedades científicas de ciências naturais encontravam-se regularmente para ouvirem conferências, tão cedo como em 1746 na Suíça e em 1822 na Alemanha, mas tais encontros tinham essencialmente um carácter regional e cobriam várias disciplinas [18]. Voltando o nosso olhar para a Física,

atente-se a que o “1º Conselho Solvay”, patrocinado pelo químico belga Ernest Solvay (1838–1922), teve lugar em Bruxelas em 1911, e este ano a celebrar o seu centenário tal como a “Sociedade Portuguesa de Química”. Foi a 1ª conferência internacional de Física, cinquenta anos depois da primeira conferência internacional de Química!

Os congressos de “química aplicada” são distintos dos que tiveram lugar entre 1860 e 1893. O 1º Congresso de Química Aplicada teve lugar em Bruxelas e Antuérpia em 3-11 de Agosto de 1894 e foi organizado por “*L’Association belge des Chimistes*” [25]. Outros se seguiram em Paris 1896, Viena 1898, etc. e que tiveram influência na profissionalização dos químicos, nomeadamente em análises químicas.



Figura 1 – Mathias de Carvalho (de Vasconcellos) (1832-1910) foi o único cientista português presente no Congresso de Karlsruhe

«NO ENCONTRO DE KARLSRUHE, predominaram rivalidades entre os congressistas de diferentes nacionalidades, dificultando o entendimento na busca de soluções para os problemas. Os químicos franceses adoptaram uma atitude conservadora em defesa do equivalentismo, enquanto que os alemães se mostraram mais abertos e progressistas. Bensaude-Vincent [...] considera que o Congresso de Karlsruhe marcou a “bifurcação” da Química alemã e da francesa, que optaram por percursos teóricos diferenciados. A opção dos alemães pelo atomismo facilitou o desenvolvimento da Química Estrutural e estudos de Estereoquímica, fundamentais para uma expansão industrial apoiada na

exploração da arquitectura molecular dos compostos orgânicos» [26]. E uma tal bifurcação vêm contribuir de novo para a proeminência da química alemã em relação à francesa e recuperar da queda da “teoria do flogisto” perante as ideias de Lavoisier sobre o papel do oxigénio na combustão, na respiração dos seres vivos e na oxidação.

Não obstante tais disputas, «outra importante consequência do Congresso de Karlsruhe (1860) foi a lei periódica dos elementos químicos. O próprio Dimitr Ivanovich Mendeleev (1834-1907) reconheceu que as definições de átomo e molécula, “votadas” no primeiro dia do Congresso, foram as principais mensagens do encontro que possibilitou a sua inovadora proposta de tabela periódica» [27]. Aliás, claramente reconhecida pela qualidade dos pesos atômicos que Cannizzaro apresentou na nota distribuída (ver Tabela 1). Só dispo de “bons” pesos atômicos era possível a construção de uma Tabela Periódica por ordenação de pesos atômicos dos elementos por uma ordem crescente. Tal seria impossível a partir de uma simples ordenação de equivalentes. Outros químicos, seguindo os critérios de Cannizzaro, determinaram os pesos atômicos de muitos outros elementos, pois a Tabela Periódica apresentada por Mendeleev e por Lothar Meyer já incorporava muitos mais elementos do que os 31 de Cannizzaro. A Tabela Periódica elaborada por Lothar Meyer em 1868, e que não foi publicada ao tempo, já incluía 52 elementos [28]. Tal como Mendeleev, Meyer foi outro dos jovens químicos que esteve presente no Congresso de Karlsruhe e um dos primeiros a adoptar o sistema de Cannizzaro e divulgá-lo na Alemanha no seu texto *Die modernen Theorien der Chemie und ihre Bedeutung für die chemische Statik* (As Teorias Modernas da Química e seu Significado para a Estática Química), publicado em 1864, onde inclui um primeiro esboço de uma tabela com 28 elementos. Foi graças a esta participação que construíram Tabelas Periódicas e mostraram a variação periódica das propriedades dos elementos em função do peso atômico. Este facto constituiu uma poderosa ferramenta preditiva, que permitiu a

Mendeleev prever a existência de novos elementos químicos e estabelecer as suas propriedades.

Tabela 1 – Breve lista de pesos atômicos coligida a partir da lista para 31 elementos apresentadas por Cannizzaro e comparadas com os pesos atômicos aprovadas pela IUPAC (2007) [29]

Elemento	Cannizzaro	IUPAC
Hidrogénio, H	1	1,0079
Oxígeno, O	16	15,999
Enxofre, S	32	32,065
Fósforo, P	31	30,974
Cloro, Cl	35,5	35,453
Bromo, Br	80	79,904
Iodo, I	127	126,90

Continue-se a seguir Maria da Conceição Marinho Oki na sua análise do congresso de Karlsruhe: «A interferência de factores políticos e sociais nos rumos da Ciência é evidente nesse episódio. Berthelot destacou-se também como político, tendo ocupado importantes cargos públicos como senador da República, presidente da Academia de Ciências e ministro da Instrução Pública. A presença no governo possibilitou a sua acção no sentido de afastar *atomistas* que ocupavam postos de destaque no meio governamental e a adopção da notação *equivalentista* na França, mesmo quando os físicos já se ocupavam com a caracterização do *electrão* [...] [A descoberta do electrão foi anunciada em 30 de Abril de 1897 num *Friday Evening Discourse* da *Royal Institution* por J. J. Thomson]. Em 1869, nas publicações da revista *Le Bulletin*, da Sociedade Química de Paris, registavam-se 25 estrangeiros e 23 franceses que utilizavam a notação *equivalentista* contra 191 estrangeiros e 22 franceses partidários da notação *atomista*, dos quais, a metade deles era constituída por alunos de Wurtz. [...] Os *átomos* foram incorporados aos manuais escolares franceses a partir de 1894. Entretanto, até 1930, eles ainda usavam a designação *hipótese atômica* e não *teoria atômica*» [30].

OBRAS DA UNIVERSIDADE DE COIMBRA SOBRE O PAPEL DA TEORIA ATÔMICA NA QUÍMICA

Durante o congresso, na sessão em que foi *chairman*, Dumas chamou a atenção para que a prolongar-se a confusão reinante em química, não só

haveria reflexos negativos no ensino e no progresso da disciplina, como poderia pôr-se em causa a segurança da sua actividade industrial [15].

Kekulé foi a figura central do Congresso de Karlsruhe. Escutemos a sua opinião: «Como químico, porém, eu recomendo a suposição de átomos, não apenas como recomendável, mas como absolutamente necessária à Química. Eu irei até mais longe, e declaro a minha crença de que *átomos químicos* existem, de modo que o termo seja compreendido para denotar aquelas partículas da matéria que não possam ser submetidas a divisões posteriores em metamorfoses químicas. Deverá o progresso da Ciência levar a uma teoria da constituição de átomos químicos, importante, tal como um conhecimento poderia ser para a filosofia geral da matéria, isto seria apenas uma pequena alteração na própria Química. O *átomo químico* permanecerá sempre a unidade química» [30].

«A hipótese de átomos contendo agregações de subátomos possibilitou uma maior compreensão dos conceitos de *valência* e *equivalente*. A *valência* seria o número de subátomos em um átomo, sua *atomicidade*; e o *equivalente* seria o peso de um subátomo [...]. A definição de *equivalente* passou a ser “o peso atômico dividido pela *valência*”, forma que os livros didáticos utilizaram para apresentar essa definição até as últimas décadas» [30].

Como referimos, no congresso de Karlsruhe esteve presente um químico português, Mathias de Carvalho (e Vasconcellos). Regressado ao país, foi eleito deputado e, em Março de 1865, é nomeado Ministro dos Negócios da Fazenda, e depois nomeado Director da Casa da Moeda, que dependia da Universidade de Coimbra. Aí tornou-se notório pelas reformas que levou a cabo na instituição, tanto na cunhagem de moeda, como no fabrico das estampilhas do imposto de selo. Deixou a direcção da Casa da Moeda para iniciar a carreira diplomática na qual se manteve até ao fim da vida. Mas o que representa Mathias de Carvalho neste debate sobre a teoria atômica?

Recuemos uma dezena de anos com a vinda a lume, em 1850, da obra “Lições de Philosophia Chimica” (Figura 2), de Joaquim Augusto Simões de Carvalho, lente catedrático da *Faculdade de Philosophia* da Universidade de Coimbra. A obra patenteia bem algumas das dificuldades estruturantes sobre o estabelecimento das fórmulas químicas de substâncias tão simples como a água.

«A lei dos equivalentes é também uma consequência necessaria dos principios da theoria atomica; porque se os diferentes corpos A, B, C, D, E, etc. podem combinar-se entre si na relação de um atomo de um com um atomo do outro, forçosamente ha de acontecer que as quantidades ponderaveis de diferentes corpos, que se combinam com uma dada quantidade d’um certo corpo, hão de também combinar-se com uma mesma quantidade d’outro corpo qualquer. Sendo assim, é evidente que os pêsos dos atomos dos diferentes corpos estarão entre si como as quantidades ponderaveis, a que damos o nome d’ equivalentes.

Era por tanto muito conveniente determinar o peso relativo dos atomos dos diferentes corpos, tomando o pêso atomico d’um d’elles por termo de comparação. Os Inglezes tomaram o pêso atomico do hydrogeno por unidade e termo de comparação; na Suécia, na Alemanha e na França adoptou-se de preferencia o oxygeno, por existir na maior parte dos compostos, e representou-se o seu pêso atomico por 100. D’esta arte, os pêsos relativos dos atomos dos diferentes corpos vem a confundir-se completamente com os equivalentes chimicos.

Há porém alguns casos, em que assim não acontece; é o que tem lugar, todas as vezes que por considerações particulares se pode suppor que o equivalente representa um multiplo ou sub-multiplo do pêso do atomo. A agua, por ex, sendo composta d’um equivalente d’hydrogeno e outro d’oxygeno, tem por formula chimica HO, em quanto que a sua formula atomica é H₂O; porque, tendo-se supposto que todos os gazes simplicies debaixo da mesma pressão e á mesma temperatura conteem o mesmo numero de

atomos em volumes iguaes, e sendo a agua formada de dous volumes de hydrogeno e um d’oxygeno, é forçoso que o atomo integrante da agua seja formado de dous atomos d’hydrogeno e um d’oxygeno. Admittida esta hypothese, é claro que o pêso do atomo do hydrogeno deve ser ametade do equivalente d’ este corpo. [...]

Demais, se todos os gazes contêm o mesmo numero, de atomos em volume igual, como é que um volume de chloro e outro de hydrogeno, produzem dous volumes de acido chlorhydrico? [...] D’este facto e d’outros semelhantes deveria immediatamente concluir-se a falsidade do principio que estabelece um igual numero de atomos em todos os gazes debaixo do mesmo volume» [31].

Mathias de Carvalho publicou, em 1855, um texto para o ensino liceal sobre “Princípios Elementares de Physica e Chimica”. Na 1ª parte, a de Física, com 109 páginas, escreve a respeito dos corpos:

«Suppõe-se, que em um corpo qualquer os atomos não existem igualmente distantes uns dos outros, mas antes agrupados de maneira que for-

mam o que se designa pelo nome de *molecula*: são por conseguinte os corpos – *agregados de moleculas*» [32].

Na 2ª parte, a de Química, com 64 páginas, aborda mais aprofundadamente a teoria atômica:

«Os chimicos dão o nome de corpos simplicies ou elementos áquelles que não temos meios de decompor em outros corpos. [...] Tanto os corpos simplicies como os compostos são *formados de moleculas* ou *atomos chimicos*» [33].

Na obra apresenta 61 elementos, nem todos correctos, e, por exemplo, sobre a água ainda refere em termos de fórmula: «protoxydo de hydrogenio ou Agua, HO» [34]. O metano, denominado “protocarbureto de hidrogénio” é apresentado com a fórmula correcta, CH₄ [35].

A obra conclui com uma “Advertencia do Auctor” com a data de 27 de Dezembro de 1857:

«Poderia dar desde ja por terminadas estas breves noções de chimica, porque para o fim a que é destinado este trabalho, não julgo que esteja



Figura 2 – Livros universitários sobre teoria atômica publicados por escolares da Universidade de Coimbra antes e depois do Congresso de Karlsruhe de 1860

defficiente em quanto ao numero de materias que comprehende; comtudo, é meu propósito tratar ainda d'alguns outros metaes e seus compostos, mais importantes, mas a falta de tempo não permite agora fazer entrar no prélo este pequeno supplemento ao que fica publicado; comprometto-me porem, apesar de auzente, a fazel-o apparecer a lume antes do fim do anno lectivo corrente» [36].

Em 1859, Joaquim Augusto Simões de Carvalho tira a lume a 2ª edição da sua obra "Lições de Philosophia Quimica", precisamente um ano antes do congresso de Karlsruhe, e que apresentará bem, ao tempo, a posição da Universidade de Coimbra no debate sobre o atomismo em química. No prefácio desta edição, na "Advertência" da obra, escreve:

«Entendi em minha consciência, que não devia eximir-me ao penoso dever de tirar a lume a segunda edição d'este livro. Não foi o interesse que me moveu a esta empreza, porque todos sabem o limitado consumo que entre nós tem as obras de sciencias naturaes, e, muito menos uma ambição litteraria mal entendida, porque sei avaliar os dotes raros e a força de trabalhos que a vida d'escriptor público exige.

Há porém uma obrigação rigorosa, a que um author não pôde faltar, sem quebra da sua dignidade, e sem offensa das necessidades e conveniencias do ensino. E corrigir e aperfeiçoar o seu livro, acompanhando os progressos e desinvolvimento da sciencia, polindo defeitos, e supprindo faltas, que sempre escapam na primeira redacção.

Os progressos da Chimica succedem-se com tal rapidez, as suas principaes hypotheses e theorias soffrem todos os dias tão variadas interpretações, que se torna uma lei irrevogavel para o escriptor, seguir este movimento incessante de descobertas e acquisições. O tempo decorrido desde que se publicou a primeira edição [9 anos], já é um intervallo grande, para registrar tantos e tão importantes descobrimentos, que vão mudando a face da Chimica» [37].

«Para comprehender e avaliar o estado presente da sciencia, é necessário consultar os Jornaes. Só nas

memórias originaes, se podem colher as verdadeiras e genuinas ideias dos autores sobre os pontos e theorias mais transcendentas da Chimica Philosophica, e que de ordinário se encontram adulteradas e sofismadas nos livros» [38].

A obra de 1859 refere, em diversas ocasiões «teoria atômica», e «no estudo actual da Chimica, compõe-se do estudo geral das particulas materiaes, a que os Chimicos dão o nome d' atomos, e do das forças a que essas partículas estão sujeitas» [39]. E prossegue:

«A theoria atomica, que acabamos d'expôr, é uma das theorias que maior influencia tem tido nas sciencias phisicas: as suas numerosas applicações à Chimica, as muitas descobertas, a que deu lugar, e a simplicidade admiravel, com que explica os factos, a collocam á frente de todas as theorias especulativas. Não obstante porém um tão feliz successo, e em consequencia d'elle, o entusiasmo com que foi geralmente recebida, esta theoria tem perdido muito do seu prestigio nestes ultimos tempos» [40].

«No estado actual da sciencia as fórmulas atomicas ou são desnecessarias, quando correspondem às formulas chemicas, ou são inuteis, quando ha discordancia entre umas e outras. Quando fosse rigorosamente demonstrado, que o não é, que a fórmula atomica da agua é H²O, para pouco nos serviria este conhecimento, em quanto que a fórmula chimica HO tem a vantagem de nos indicar immediatamente a composição da agua, ou a relação entre as quantidades ponderaveis dos principios componentes» [41].

As controvérsias sobre as «fórmulas químicas» permanecem em Simões de Carvalho, mas a noção de *átomo químico*, já presente na obra anterior de Mathias de Carvalho, surge bem clarificada:

«a molecula tem uma grandeza constante e invariavel em cada corpo, e não pôde ser alterada, sem alteração na natureza do corpo; atomo chimico e molecula são expressões equivalentes» [42].

«Se estas particulas são ou não divisiveis ao infinito, não o podemos nós

saber, e pouco importa para a explicação dos factos; basta que elas sejam indivisiveis sob a acção das forças chemicas, ou, por outras expressões que cada corpo se divida sempre em particulas da mesma grandeza, todos as vezes que elle entrar em combinação com outro. A estas particulas deu Berzelio o nome de *atomos chemicos*, que não devem confundir-se com atomos reaes ou atomos phisicos, ultimo termo da divisão possivel na hypothese de que a materia não é divisível ao infinito» [43].

Indubitavelmente, as obras sobre a teoria atômica dos escolares conimbricenses vão patenteando progressos com o decurso do tempo. Merece realce a «dissertação inaugural» publicada em 1871 – "Da Atomicidade. Estudo sobre as theorias chemicas modernas" (Figura 2) – para o «Acto de Conclusões Magnas» da Faculdade de Philosophia, na qual Francisco Augusto Corrêa Barata apresenta uma visão apoiada nas ideias de Wurtz sobre *atomicidade*, o poder de combinação dos átomos:

«Alem dos atomos admitte-se, para explicar a constituição dos corpos, a noção de *molecula*. Esta hypothese liga-se naturalmente á primeira, porque a molecula nada mais é, em geral, do que uma reunião de atomos. [...] Quando a molecula é formada por átomos de diferente natureza, o corpo é composto; quando é formada por átomos idênticos, o corpo é simples» [44].

Corrêa Barata também beneficia de uma obra vinda a lume em 1867, "Novos Pesos Atômicos" [45], e que cita, o que nos obriga a um breve parêntesis na nossa exposição. Trata-se da tese de José Julio Bettencourt Rodrigues (1843-1893) para o concurso para lente Substituto de Química Inorgânica na Escola Polytechnica de Lisboa (Figura 2). A tese reflecte o pensamento da escola de química da Universidade de Coimbra, pois Bettencourt Rodrigues aí se havia formado com um Bacharelato em Matemática e Filosofia, precisamente no mesmo ano do concurso (1867). E conclui esta dissertação do seguinte modo:

«A antiga noção de equivalente deve desaparecer da sciencia, como inexacta, insufficiente e confusa, substi-

tuindo-se os equivalentes pelas grandezas ponderáveis do átomo e da molecula» [46].

Os pesos atômicos apresentados já são próximos dos actuais: por exemplo, C=12; O=16; S=32, Cl=35,5, Br=80, I=127, etc. [47-49]. «Representemos um composto qualquer pela formula $np + n'p'$, em que n e n' representam os números de átomos p e p' , que nelle existem. Seja p' o escolhido para a unidade de pesos atômicos e equivalentes. O peso atômico do corpo p , por mais que variem n e n' , será sempre expresso pela relação p/p' , inteiramente independente d'aquelles números. Não succede porém o mesmo aos equivalentes, que exprimem a relação $np/n'p'$ » [50].

É de realçar que para interpretar a afinidade entre átomos iguais, como na reacção entre o hidreto de cobre e o ácido clorídrico, o autor vá admitir uma "polaridade eléctrica" oposta aos dois átomos de hidrogénio: $(-)\text{HCu} + (+)\text{HCl} = \text{CuCl} + (-)\text{H}(+)\text{H}$ [51]. Raciocínio idêntico aplica-o em outros casos, como na formação da molécula de oxigénio. Reminiscência e generalização indevida de um dualismo eléctrico de Berzelius. Esta obra ainda refere o termo «átomo chimico» [52], como em Simões de Carvalho, mas ainda não se havia alcançado a correcta fórmula molecular para moléculas orgânicas tão simples e importantes como a do ácido acético ($\text{C}^4\text{H}^4\text{O}^4$) [53].

José Júlio Rodrigues desempenhou um papel pioneiro no desenvolvimento da fotografia no nosso país, bem como «na aplicação dos processos fotomecânicos na elaboração de mapas, tendo desenvolvido e aperfeiçoado alguns destes processos, nomeadamente, a fotozincografia, a fotolitografia com placas de estanho, a toponímia, bem como a impressão a cores» [54]. Segundo Maria Estela Jardim *et al.* «José Júlio Rodrigues destacou-se a nível europeu na área da Química, estando ligado a Wurtz, von Hofmann e M. Frémy».

Retomando a obra de Corrêa Barata, verifica-se que já apresenta correctamente a fórmula da molécula da água, H^2O , e do oxigénio, OO [55]. Iguualmente, avança pelos conceitos

de radical, "teoria dos tipos", "família" de moléculas. Como expressão de um progresso na interpretação da teoria atômica em química orgânica, a fórmula molecular do ácido acético já surge correcta ($\text{C}^2\text{H}^4\text{O}^2$) [56], bem como, por exemplo, a fórmula estrutural da etilamina (o símbolo do azoto ainda é Az) [57]; a obra já não faz referência ao termo «átomo atômico». E este autor esclarece-nos:

«Veja-se agora a que distancia estão as idéas actuaes d'aquellas que, ainda não vai muito tempo [12 anos], eram enunciadas por um sabio professor e elegante escriptor nosso [refere-se a Simões de Carvalho em "Lições de Philosophia Chimica", edição de 1859]» [58].

Se a presença de Mathias de Carvalho no Congresso de Karlsruhe teve alguma influência num mais actualizado entendimento da teoria atômica em Coimbra, não podemos afirmar com base em factos e testemunhos escritos. Com efeito, este professor publicou em "*O Instituto*", em 1858 e 1859, e "*Relatórios dirigidos à Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra pelo seu vogal em comissão fora do reino*", mas não surge qualquer publicação posterior [59].

No entanto, é de destacar a posição de Corrêa Barata sobre a «variabilidade ou invariabilidade da atomicidade». Segue a primeira das hipóteses, sustentada por Wurtz, de quem foi discípulo Mathias de Carvalho, em detrimento da última, defendida por Kekulé explicitamente «no Congresso dos naturalistas e medicos allemães, reunidos em Innsbruck, em 1869» [60]. E verifica-se que a respeito da «teoria atômica», em Coimbra segue-se a corrente minoritária em França, defendida pelos discípulos de Wurtz, mas que veio a ser a corrente triunfante na Alemanha e na Grã-Bretanha. A dissertação de Corrêa Barata, reflecte bem, no panorama da química coimbrã, os progressos sem precedentes que o Congresso de Karlsruhe possibilitou ao desenvolvimento da Química Orgânica na segunda metade do século XIX e muito em especial enuncia:

«Para os gazes compostos a lei de Avogadro e Ampère enuncia-se da se-

guinte forma: volumes eguaes de dois gazes compostos contêm o mesmo numero de *moleculas*» [61].

O nome de Avogadro não é referido por Simões de Carvalho, mas já surge na obra de José Júlio Rodrigues:

«Avogadro, chimico italiano e depois Ampère e Berzelius, disseram que volumes eguaes de gazes simples encerram o mesmo numero de atomos, suppondo, já se vê, egualdade de pressão e de temperatura. É comtudo este enunciado geralmente conhecido pelo nome de lei de Ampère» [62].

Para um pouco adiante no exame crítico desta lei, concluir:

«vê-se que não ha razão alguma necessaria, que determine a existencia da lei de Ampère, conforme foi enunciada» [63].

Acresce o significativo número de livros de químicos portugueses vindos a lume no período de uma geração sobre a teoria atômica, e com uma notável periodicidade (1850, 1855, 1859, 1867 e 1871), revelador de que a Universidade Portuguesa não esteve alheia à importância estruturante para a Química e a Física dos progressos incrementais desta temática.

Entre 1859 e 1861, Agostinho Vicente Lourenço trabalhou no laboratório de Adolphe Wurtz, em Paris. Aí recebeu a visita de Kekulé em meados de 1859, quando este se deslocou para tratar da organização do congresso com Wurtz; Lourenço e Kekulé eram amigos desde os tempos de Heildelberg onde ambos haviam estado [19]. Aí se encontrava ao tempo Mathias de Carvalho. Contudo, só houve um português presente em Karlsruhe e foi o segundo destes químicos.

Mathias de Carvalho era lente da *Faculdade de Philosophia* na Universidade de Coimbra, uma escola que já havia editado livros de texto relevantes para os temas do congresso, um dos quais de sua autoria. Como refere António J. F. Leonardo: «Se bem que a revista científica fosse vital para o desenvolvimento da ciência, o livro científico conservou o seu maior estatuto, nomeadamente na transmissão de conteúdos mais abrangente e com

Tabela 2 – Conceitos e termos da teoria atômica utilizados em química em obras universitárias portuguesas

Autores	Simões de Carvalho	Mathias de Carvalho	Simões de Carvalho	Julio Rodrigues	Corrêa Barata
Data de edição	1850	1855	1859	1867	1871
Átomo	sim	sim	sim	sim	sim
Molécula	sim	sim	sim	sim	sim
Teoria atômica	sim		sim	sim	sim
Equivalente	ácido sulfúrico $500 = 1\text{ S}$ (200) + 3 O (100)		ácido sulfúrico $500 = 1\text{ S}$ (200) + 3 O (100)	inútil	ideia banida
Átomo químico	sim	sim	sim	sim	
Atomicidade				sim	sim
Valência					quantivalencia
Fórmulas da água	HO (fórmula química)	HO (protoxydo de hydrogenio)	HO (fórmula química)	HO	
	H ² O (fórmula atômica)		H ² O (fórmula atômica)	$\left. \begin{matrix} \text{H} \\ \text{H} \end{matrix} \right\} \text{O}$	H ² O (molécula de água)
Acido sulfúrico	SO ³	SO ³	SO ³		$\left. \begin{matrix} \text{SO}^2 \\ \text{H}^2 \end{matrix} \right\} \text{O}^2$
Acido carbónico	C ² O ³		C ² O ³		
Metano		CH ⁴ protocarbureto de hydrogenio			CH ⁴
Acido acético				C ⁴ H ⁴ O ⁴	C ² H ⁴ O ²
Benzeno				C ¹² H ⁶ (benzina)	C ⁶ H ⁶ (benzina)

maior impacto» [64]. A Tabela 2 faz um breve resumo de conceitos e termos da teoria atômica utilizados em química nas obras publicadas por diplomados pela Universidade de Coimbra entre 1850 e 1871, portanto antes e depois do Congresso de Karlsruhe de 1860. Neste contexto, surge com bastante naturalidade a “presença da Universidade de Coimbra”, através de Mathias de Carvalho, neste marco da história da ciência, interesse que permaneceu para além de Karlsruhe nos seus professores.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos à Técnica de BAD Maria Judite Laranjeira, todo o apoio prestado na obtenção de livros e documentos antigos, e agradece-se igualmente o apoio financeiro da Fundação para a Ciência e a Tecnologia.

REFERÊNCIAS

- [1] A.K. Nielsen, S. Štrbáňová (ed.), *Creating Networks in Chemistry. The Founding and Early History of Chemical Societies in Europe*, RSCPublishing, Cambridge, 2008.
- [2] A.K. Nielsen, S. Štrbáňová, *Creating Networks in Chemistry. The Founding and Early History of Chemical Societies in Europe*, RSCPublishing, Cambridge (2008) 330.
- [3] D. Knigh, *Ideas in Chemistry. A History of the Science*, The Athlone Press, London (1992) 82; J.F. Fulton, *A Bibliography of the Honourable Robert Boyle*, 2nd ed, Oxford (1961) 9ff.
- [4] J. Calado, *Haja Luz! Uma história da química através do tudo*, IST Press, Lisboa (2011) 97.
- [5] J.A.S. Carvalho, *Lições de Philo-sophia Chimica*, Imprensa da Universidade, 2^a ed., Coimbra (1859) 20.
- [6] Knigh, *ob. cit.*, p. 11.
- [7] B. Bensaude-Vincent, I. Stengers, *A História da Química*, Instituto Piaget, Lisboa (1996) 134.
- [8] Knigh, *ob. cit.*, p. 148.
- [9] M.E.S. Eusébio, M.L.P. Leitão, J.S. Redinha, *Apontamentos da história do Laboratório Químico da Universidade de Coimbra. A evolução da espectroscopia, Química, Boletim da SPQ*, **93** Abril-Junho (2004) 33-41.
- [10] M. Freemantle, *Chem. Eng. News*, **25** Agosto (2003) 27-30.
- [11] Calado, *ob. cit.*, pp. 481-484.
- [12] *Id.*, p. 484.
- [13] Bensaude-Vincent, Stengers, *ob. cit.*, p. 196;
- [14] P.R. Polo, *Anales de Química*, **106** (2010) 231 – 239.
- [15] C. de Milt, *J. Chem. Educ.*, **28** (1948) 421-425.
- [16] M.C.M. Oki, *Química Nova*, **26** (Novembro 2007) 24-28; acessível em <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc26/v26a07.pdf>.
- [17] Charles-Adolphe Wurtz (1817-1884). *Accounts of the Sessions of the International Congress of Chemists in Karlsruhe*, 3, 4 and 5 September 1860”; em <http://web.lemoyne.edu/~giunta/karlsruhe.html> (acedido em 29-04-2005).
- [18] M.W. Mönnich, *Chemistry International (IUPAC)*, **32** (2010) 10-14.
- [19] C. Milt, *Chymia*, **1** (1948) 153-169.
- [20] S. Cannizaro, “Sunto di un corso di filosofia chimica”, Pisa, 1858; Román Polo; *ob. cit.*
- [21] S.J. Formosinho, *Nos Bastidores da Ciência. 20 Anos Depois*, Imprensa da Universidade de Coimbra, Coimbra (2007) 98, 111.
- [22] Román Polo apresenta Simões de Carvalho como o representante português, mas perante a acta em “Charles-Adolphe Wurtz (1817-1884), Account of the Sessions of the International Congress of Chemists in Karlsruhe, on 3, 4, and 5 September 1860” (em <http://bit.ly/9KrG9x>, acedido em 8-06-2011) a registar Mide Carvalho (M. de Carvalho) refere-se a Mathias de Carvalho, ao tempo a trabalhar em Paris com Wurtz.
- [23] A.J.F. Leonardo, “O Instituto de Coimbra e a evolução da Física e da Química em Portugal de 1852 a 1952”, dissertação de doutoramento, Universidade de Coimbra (2011) 103.
- [24] *Id.*, p. 241.

- [25] D. Thorburn Burns e H. Deelstra, *Micromochim Acta*, **172** (2011) 277–283.
- [26] Oki, *ob. cit.*, com ortografia adaptada.
- [27] A.J. Ihde, *The Development of Modern Chemistry*, A Harper International Student Reprint, New York (1964) 243-249; Oki, *ob. cit.*.
- [28] Ihde, *ob. cit.*, p. 250.
- [29] Ihde, *ob. cit.*, p. 226-230; Román Polo, *ob. cit.*.
- [30] Oki, *ob. cit.*, com ortografia adaptada.
- [31] J.A.S. Carvalho, *Lições de Filosofia Chimica*, Imprensa da Universidade, 1ª ed., Coimbra (1850) 225-226.
- [32] M.C. Vasconcellos, *Princípios Elementares de Physica e Chimica. 1ª Parte, Princípios de Physica*, Imprensa da Universidade, Coimbra (1855) 1-2.
- [33] M.C. Vasconcellos, *Princípios Elementares de Physica e Chimica. 2ª Parte, Princípios de Chimica*, Imprensa da Universidade, Coimbra, (1855) 2.
- [34] *Id.*, p.15.
- [35] *Id.*, p.29.
- [36] *Id.*, p. 64.
- [37] S. Carvalho, *Lições de Philosophia Chimica*, Imprensa da Universidade, 2ª ed., Coimbra, Setembro de 1859, Advertencia.
- [38] *Id.*, p. XI.
- [39] *Id.*, p. 9.
- [40] *Id.*, p. 225.
- [41] *Id.*, p. 232.
- [42] *Id.*, p. 245.
- [43] *Id.*, p. 243.
- [44] F.A.C. Barata, *Da Atomicidade. Estudo sobre as theorias chimicas modernas*, Imprensa da Universidade, Coimbra (1871) 18.
- [45] J.J. Rodrigues, *Estudos sobre as Bases Fundamentais dos Novos Pesos Atômicos e suas Relações Physicas Mais Notáveis*, Typographia Universal, Lisboa, 1867.
- [46] *Id.*, Conclusão p. 129.
- [47] *Id.*, p. 17, nota 1,
- [48] *Id.*, p. 18.
- [49] *Id.*, p. 91.
- [50] *Id.*, pp. 46, 47.
- [51] *Id.*, p. 20.
- [52] *Id.*, pp. 28-34, 71, 76, 77, 80, 92, 98.
- [53] *Id.*, p. 50.
- [54] M.E. Jardim, F.M. Costa e I.M. Peres, “José Júlio Rodrigues e a sua contribuição para o desenvolvimento da cartografia portuguesa e dos processos fotomecânicos do século XIX”, *II Simpósio Luso-Brasileiro de Cartografia Histórica*, Lisboa, 25 e 26 de Outubro 2007, em http://www.igeo.pt/servicos/DPCA/PDF/007_EstelaJardim.pdf (acedido em 14-06-2011).
- [55] C. Barata, *ob. cit.*, p. 38.
- [56] *Id.*, p. 31.
- [57] *Id.*, p. 43.
- [58] *Id.*, p. 62.
- [59] O Instituto, “As ciências Físico-Químicas n’ O Instituto”, “*Índices Ideográfico, Cronológico e Onomástico*” em <http://www.uc.pt/bguc/PDFS/IndicesFisica> (acedido em 22-06-2011). O mesmo índice encontra-se reproduzido no Anexo I da dissertação de doutoramento de A. J. F. Leonardo.
- [60] C. Barata, *ob. cit.*, p. 155.
- [61] *Id.*, nota 1, p. 39.
- [62] J. Rodrigues, *ob. cit.*, p. 93.
- [63] *Id.*, p. 98.
- [64] Leonardo, *ob. cit.*, p. 14.



ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

TRANSMUTAÇÃO ÁCIDO A BASE

Ao contrário dos esforços infrutíferos dos alquimistas na transmutação de metais em ouro, um grupo de investigação conseguiu agora a transmutação bem sucedida de compostos de boro de natureza ácida em aductos de borileno estáveis, que apresentam um carácter básico semelhante às aminas. A basicidade dos aductos pode conduzir ao desenvolvimento de novos catalisadores. Os borilenos, complexos monovalentes de boro com um par de electrões não ligantes e duas orbitais não ocupadas, têm sido até agora observados apenas de uma forma transitória como intermediários. Foi possível também obter espécies estáveis por coordenação dos borilenos com metais de transição. No entanto, ainda não se tinham observado aductos de borileno estáveis e com propriedades básicas. O professor de química Guy Bertrand da University of California, em Riverside, e do Centre National de la Recherche Scientifique, de França, e colaboradores,

fizeram agora reagir um carbeno com um composto de boro de modo a sintetizar o primeiro aducto de borileno não metálico estável (Science, DOI: 10.1126/science.1207573). Este aducto é uma base que pode ceder um par de electrões não ligantes. Os ligandos geralmente usados na construção de complexos catalíticos metálicos deverão ser compostos que possuam pares de electrões não ligantes, como bases de nitrogénio e fósforo. Os compostos de boro ácidos não verificam este requisito, mas os correspondentes compostos básicos poderão revelar-se úteis no desenvolvimento de uma nova classe de catalisadores. Deste modo, a UC Riverside propôs uma patente referente a este tipo de ligandos. Os borilenos são deficientes em termos de electrões, já que possuem apenas quatro electrões, e não os habituais oito, na sua camada de valência. A cedência de dois pares de electrões provenientes de radicais de carbeno às duas orbitais vazias possibilita que o aducto de

borileno estabilize e assuma uma configuração idêntica à do nitrogénio.

Bertrand e colaboradores demonstraram a basicidade do aducto de borileno através da sua protonação, obtendo o respectivo ácido conjugado, e oxidando o aducto de modo a formar um radical catiónico semelhante aos obtidos a partir da oxidação de aminas. Quer o aducto de borileno, como o catião correspondente, são estáveis sob argón à temperatura ambiente por um período de pelo menos dois meses.

(adaptado do artigo de 01/08/2011 de Stu Borman: Acid-To-Base Transmutation
Chemical & Engineering News –
<http://pubs.acs.org/cen/news/89/i31/8931notw7.html>)

Paulo Brito
(paulo@ipb.pt)
Instituto Politécnico de Bragança

PERSPECTIVAS DA QUÍMICA COMPUTACIONAL

FERNANDO M. S. SILVA FERNANDES*

INTRODUÇÃO

Laboratórios e batas brancas. Destiladores, tubos de ensaio, buretas e provetas. Ácidos, bases e sais. Fumalinas, cores e odores. Sínteses e análises. Tintas, vernizes, detergentes e plásticos. Alimentos e medicamentos. Células biológicas, vírus e bactérias. Eléctrodos, baterias e sensores. Fórmulas e modelos moleculares. Arte e geometria. Átomos e moléculas em movimento. Indústrias química, agroquímica e farmacêutica. Cisões e fusões nucleares. Estrelas, cometas e planetas. Internet, semi-condutores e computadores. Agatha Christie e Conan Doyle.

Estas são realidades onde a Química está sempre presente. A sua vasta área é de importância crucial, desde a escala atómica à galáctica, contribuindo para desvendar os mecanismos da Natureza, e para a saúde, bem-estar e progresso do ecossistema.

Contudo, em alguns meios sociais ainda surge, por vezes, a ideia de que os químicos andam nos laboratórios a misturar reagentes e a usar computadores, em lucubrações teóricas e tentativas de descobrir o “elixir da longa vida”, ou a inventar bombas e outros produtos letais que levarão à destruição da Humanidade. Esta imagem alquímica, guerreira e poluente é irreal. Urge rebatê-la, combatendo a subjacente iliteracia científica.

Os cientistas são, em geral, ética e profissionalmente responsáveis, embora muitas vezes ultrapassados por decisões políticas irreflectidas ou ambiciosas. Qualquer actividade científico-tecnológica que busque a inovação pode ter o “reverso da medalha”.

Contudo, *somente* os cientistas e técnicos, com os seus conhecimentos e métodos, podem corrigir consequências menos positivas que eventualmente surjam. Investir em ciência e tecnologia (e *humanidades*, sublinhe-se), com critérios justificados e dando efectivas oportunidades às gerações mais novas, é o caminho para o progresso saudável da Sociedade.

Neste artigo (uma contribuição para as celebrações do Ano Internacional da Química, AIQ 2011), divulgam-se aspectos essenciais da *Química Computacional*, um ramo interdisciplinar da Química que serve todas as suas especialidades, tecnologias e indústrias afins. Os alicerces foram lançados nos anos 50 do século passado, em simultâneo com a implementação dos primeiros computadores. Actualmente, qualquer pessoa, curiosa e persistente, pode aprendê-la, servindo-se dum vulgar computador pessoal ligado à Internet. É, realmente, um desafio. Até há quem diga que a Química Computacional é um incomensurável tronco pertencente aos séculos XXI e vindouros, do qual alguns ramitos começaram a cair no século XX.

OBJECTIVOS, MÉTODOS E PROGRAMAS

No que se segue, os leitores menos familiarizados com estes temas poderão encontrar termos e técnicas que desconhecem. Assim, recomenda-se a consulta das referências [1-6]. São fontes de material didáctico, software e técnicas de programação que cobrem grande parte dos tópicos abordados neste artigo. Adicionalmente, nos endereços dos grupos de investigação mencionados ao longo do texto, encontram-se outras referências a assuntos das respectivas especialidades.

A Química Computacional consta, em última instância, do desenvolvimento e utilização de software dedicado

à resolução de problemas químicos, bioquímicos, tecnológicos e industriais. A sua vastidão leva a que se identifiquem algumas vertentes como a *Modelação Molecular* (ou *Simulação Molecular*), *Quimiometria*, *Quimioinformática* e *Bioinformática* que, embora com notáveis intersecções, sistematizam objectivos e métodos específicos:

- (I) Cálculo de propriedades de moléculas reais ou ainda não sintetizadas, e de sistemas moleculares (sólidos, líquidos, gases, plasmas, interfaces e organismos biológicos). A gama de propriedades estende-se desde as estruturas electrónicas e conformações das moléculas, até aos diferentes tipos de energia, dinâmica e reactividade de sistemas moleculares. Os fundamentos são teorias e modelos da mecânica clássica e quântica, do electromagnetismo e da termodinâmica estatística, cujos métodos computacionais típicos são: *ab initio* e DFT, mecânica e dinâmica moleculares, Monte Carlo, incluindo os de cinética química, minimização de energia, análise conformacional e espectroscópica, integração e perturbação termodinâmicas, tratamento de erros e docking. Estes aspectos são usualmente associados à designação Modelação Molecular (ou Simulação Molecular).
- (II) Análise e tratamento da informação química, proveniente de experiências laboratoriais, monitorização instrumental/industrial e simulações, em tempo-real ou armazenada em bases de dados (tipicamente com números de entradas da ordem de vários milhões) para, por exemplo: (a) previsão de espectros (RMN, Infravermelho, Massa, etc.) que complementam a comprovação de sínteses químicas; (b) determinação de relações

* Centro de Ciências Moleculares e Materiais, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa
E-mail: fsilva@fc.ul.pt

de estrutura-actividade molecular (QSAR); (c) planeamento e assistência de técnicas experimentais automatizadas (como a química combinatorial, “high-throughput screening” e “flowsops”) dirigidas à síntese de vários produtos em simultâneo, de interesse químico, agroquímico e farmacêutico; (d) determinação de sequências genéticas; (e) classificação automática de reacções químicas e bioquímicas; (f) reconhecimento de padrões; (g) controlo de qualidade e calibração instrumental.

A par de técnicas de modelação molecular, usam-se métodos mais específicos, como a análise de componentes principais, optimização multivariada, redes neuronais artificiais, algoritmos genéticos, autómatos celulares e “expert systems” que, por sua vez, são também utilizados em muitos problemas de modelação molecular (minimização de energia, análise conformacional, estimativa de erros, regressão, ajustes não-paramétricos, concepção de novos materiais e fármacos, etc.). Estes aspectos, nas fronteiras entre a Química e as *Estatística, Informática e Inteligência Artificial*, associam-se aos nomes Quimiometria ou Quimioinformática e Bioinformática.

As exigências de cálculo numérico e simbólico, e de arquivo, edição e visualização de enormes quantidades de informação química tornam o computador instrumento-chave em Química Computacional. Contudo, tratando-se duma máquina, tem de ser instruído. A programação surge, assim, como um recurso imprescindível, em linguagens como o Fortran, C++, Java e Prolog. Actualmente, existem vários pacotes de software, académicos ou comerciais, com visualização molecular interactiva (Gaussian, Gromacs, Towhee, Dock, Maddam, Spinus, ChemOffice, etc.), que podem ser utilizados quase como “caixas-pretas” e que servem proficuamente as diversas vertentes da Química Computacional. No entanto, os grupos de investigação têm frequentemente de desenvolver os seus próprios programas quando o tipo de problemas não está contemplado nos pacotes ou estes não apresentem a fiabilidade requerida. A programação

é um desafio e um prazer intelectual (experimente-se!) e, saliente-se, que são químicos, bioquímicos, físicos e biólogos que mais contribuem para esses softwares, cedidos muitas vezes gratuitamente.

Há que referir dois tipos essenciais de programas computacionais conforme os problemas a resolver. Por exemplo, a computação da estrutura electrónica duma molécula ou a dinâmica molecular dum líquido são problemas em geral bem definidos, quer nos dados a introduzir, quer nos resultados expectáveis. Os respectivos programas são do tipo convencional, isto é, um conjunto de operações elementares e sequenciais que processam dados completos e precisos, conduzindo a respostas únicas. Baseiam-se fortemente em métodos matemático-numéricos, mais ou menos sofisticados, recorrendo ao cada vez maior poder de cálculo dos computadores.

Contudo, existem outros problemas químicos que não podem ser eficientemente resolvidos através daqueles programas. O aspecto essencial não é mais poder computacional e sofisticação matemática, mas uma aproximação diferente. Considere-se, por exemplo, a determinação do número de isómeros da molécula $C_{26}H_{54}O$ que são álcoois, o planeamento de sínteses químicas com vista a novos medicamentos e materiais, a estereoquímica de proteínas e a determinação das conformações de energia mínima de outras moléculas complexas, as sequências genéticas, a selecção de parâmetros óptimos em análise instrumental, o controlo automático de unidades industriais de larga escala, a dispersão de poluentes, e a análise e tratamento de bases de dados químicas. Estes casos tipificam a denominada *explosão combinatoria*, ou seja, o número de hipóteses e detalhes é tão grande que não é possível utilizar apenas programas convencionais para obter respostas em tempo útil, mesmo utilizando a força bruta dum supercomputador e técnicas numéricas sofisticadas. Por outro lado, quer os dados, quer os resultados destes casos possuem geralmente incertezas intrínsecas, implicando que as operações adequadas para a sua resolução não tenham uma sequência

bem definida (como nos algoritmos convencionais) e a possibilidade de várias respostas com diferentes níveis de confiança.

A abordagem destes problemas recorre a métodos de Inteligência Artificial, os quais tentam simular num computador o raciocínio inteligente, os mecanismos genéticos, e a aquisição e manipulação do conhecimento. Uma das aproximações-chave baseia-se no facto do cérebro, constituído por uma rede de neurónios massivamente paralela, não funcionar sequencialmente. Os neurónios têm, individualmente, um funcionamento semelhante e porventura simples, mas dispostos em arquitecturas paralelas possuem a capacidade de processamento simultâneo e integrado, trocando entre eles a informação recebida do exterior ou gerada internamente manifestando, entre outros, dois aspectos essenciais do raciocínio: “os saltos intuitivos” e a capacidade de aprendizagem com a experiência.

Quem faça palavras cruzadas reconhecerá os saltos intuitivos: certamente não executa a *procura exaustiva* de todas as palavras que conhece e que possam caber no espaço indicado; basta muitas vezes uma única letra para ter o seu “salto”. Um algoritmo convencional não teria outra alternativa senão a da procura exaustiva. Por outro lado, só se aumenta o desempenho da condução automóvel (isto é, só se aprende) com a experiência repetida e a memorização. Um programa convencional não é capaz de memorizar e aprender. Uma vez escrito fica imutável até que o programador o altere.

Os programas de inteligência artificial (redes neuronais, algoritmos genéticos, “expert systems”, etc.) reproduzem num computador essas capacidades com considerável sucesso, suportando a resolução de problemas de larga escala e complexidade.

Por exemplo, o número de moléculas que potencialmente podem actuar como fármacos estima-se ser da ordem de 10^{40} . Deste número astronómico de possibilidades, apenas uma ínfima fracção será eventualmente sintetizada, e desta, somente um nú-

mero ainda menor será submetido a “high throughput screening” para testes humanos. Qualquer procedimento computacional concebido para esse fim deve ser capaz de procurar através do enorme número de potenciais fármacos *sem efectivamente inspeccionar cada uma das estruturas moleculares*.

Esses programas tornam possível, também, a incorporação numa área de crescente interesse químico e tecnológico: a *lógica difusa* (“fuzzy logic”). Esta lógica mostra que, afinal, as regras formais de raciocínio estabelecidas por Aristóteles são demasiadamente rígidas, não permitindo o tratamento adequado de inúmeros problemas complexos. De facto, a resposta a uma questão pode não ser exactamente “sim” ou “não”, mas “talvez”; a cor dum objecto pode não ser exactamente “preto” ou “branco”, mas “cinzento”, existindo dentro deste uma infinidade de tonalidades. Actualmente, é vulgar encontrar processadores “fuzzy” em máquinas de lavar roupa e louça, automóveis e ar condicionado. Estes processadores, contrariamente aos digitais (de 0’s e 1’s), permitem uma variação contínua entre 0 e 1, conduzindo a controlos suaves com substanciais poupanças de energia e água.

TÓPICOS REPRESENTATIVOS

Em grupos de investigação de universidades, institutos e empresas portuguesas desenvolve-se uma intensa e frutuosa actividade nas diferentes vertentes da Química Computacional. No que se segue, seleccionaram-se aplicações desenvolvidas nalguns desses grupos, representativas da importância deste ramo da Química. Sublinhe-se, no entanto, que, neste artigo, não se pretende fazer uma revisão da actividade científica nacional nesta área, mas apenas exemplificar uns quantos aspectos computacionais da química fundamental e aplicada, bioquímica, agroquímica e medicina.

Numa publicação posterior será apresentada uma revisão exhaustiva dos grupos de Química Computacional em Portugal, resultante de um inquérito realizado a nível da Sociedade Portuguesa de Química. Isso seria

inadequado neste artigo considerando o número de grupos cuja actividade se estende do Minho ao Algarve, Madeira e Açores. Assim, os grupos não mencionados na selecção seguinte serão certamente referidos na revisão, a qual esperamos que seja também apresentada numa página da Internet com vista a uma ligação directa aos endereços dos diferentes grupos e permanente actualização.

NANOCLUSTERS E LÍQUIDOS IÓNICOS

O cloreto de potássio (KCl) é um sal (halogeneto alcalino) utilizado, por exemplo, em fertilizantes líquidos, processamento de alimentos e medicina. Cristaliza numa geometria cúbica e funde a 1043 K (770 °C). As suas propriedades (como as de qualquer substância) são geralmente determinadas com amostras que, por muito pequenas, sob o ponto de vista macroscópico, contêm sempre números de iões (K⁺ e Cl⁻) da ordem do número de Avogadro (6,023x10²³). Lord Kelvin deu a noção da grandeza deste número num modo apelativo: “Encha-se um copo com água cujas moléculas foram marcadas. Deite-se essa água num dos oceanos e deixe-se as moléculas espalharem-se por todos os mares do mundo. Encha-se de novo o copo em qualquer dos mares. Nele estarão cerca das 100 moléculas inicialmente marcadas”.

Como se comportarão microagregados de KCl com números de iões apenas da ordem das dezenas, centenas ou milhares? Apresentarão também transições e coexistência de fases? E a que temperaturas? O cloreto de potássio pode formar vidros quando o líquido é arrefecido bruscamente. E os microagregados? Serão as leis dos grandes números aplicáveis a sistemas com um número muito pequeno de moléculas? Note-se que a origem de qualquer material são microagregados com dimensões lineares da ordem do nanometro (10⁻⁹ m), designados por *nanoclusters*. Estas questões são de importância fundamental. A propósito, Schrödinger, no famoso clássico “What is life?”, interroga-se sobre as regularidades observadas nas células biológicas, com fina reprodutibilidade, e consequentes do ADN que é constituído por um núme-

ro de moléculas muitíssimo inferior ao número de Avogadro. De facto, sob o ponto de vista estritamente microfísico, apenas de sistemas macroscópicos deveriam emergir propriedades e leis com flutuações desprezáveis.

Estes aspectos são particularmente adequados para a simulação computacional pelo *método da dinâmica molecular*. Sucintamente, um programa de dinâmica molecular calcula as posições e velocidades das partículas em cada instante (ou seja as suas trajectórias) usando a lei de Newton (força = massa x aceleração). A partir das trajectórias o computador pode produzir filmes, e calcular propriedades como a temperatura, pressão, energias cinética e potencial, energias livres, coeficientes de difusão, viscosidade, condutividades térmica e eléctrica, correlações espaciais e temporais, e intensidades espectroscópicas.

Os resultados obtidos numa série de simulações sobre transições e coexistência de fases, ilustradas por filmes produzidos por Pedro Rodrigues, estão disponíveis em [7]. As simulações mostram que os nanoclusters apresentam transições de fase sólido-líquido cujos pontos de fusão aumentam com a dimensão dos clusters, tendendo para o valor da temperatura de fusão do macrosistema (os clusters com 512 iões já têm pontos de fusão de ~1000 K) e formam vidros quando o líquido é arrefecido bruscamente. A partir de ~1000 iões sustêm, também, coexistência de fases (figura 1). Não serão, realmente, os nanoclusters os “genes” dos macro materiais?

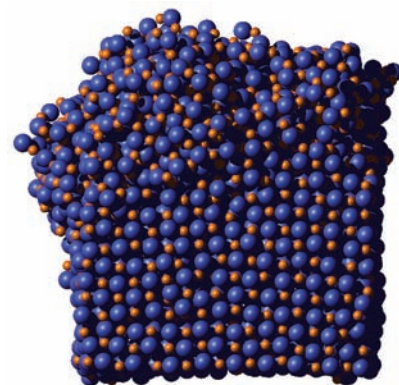


Figura 1 – Coexistência sólido-líquido num nanocluster de KCl com 5832 iões

A respeito de materiais, Rui Fartaria [8], por exemplo, tem realizado simulações sobre nano-compósitos de polímeros argilosos, suspensões coloidais e cristais líquidos. Por outro lado, no CICECO [9], simulam-se diferentes materiais relacionados com investigações principalmente orientadas para a tecnologia.

No contexto de sistemas iónicos, os líquidos iónicos em particular, com aplicações importantes no processamento de celulose e combustíveis nucleares, em baterias, na extracção de compostos vegetais com fins nutricionais, cosméticos e farmacêuticos, e em química verde, têm tido contribuições computacionais de vários grupos como o de Canongia Lopes [10], em colaboração com grupos experimentais.

ADSORÇÃO E SIMULAÇÃO QUÂNTICA

Os alcanotióis são facilmente adsorvidos por eléctrodos de ouro, através do grupo tiol (-SH), dada a grande afinidade entre o enxofre e o ouro. Após a adsorção a partir de uma solução em etanol, as moléculas automontam-se sobre a superfície do ouro, constituindo monocamadas densas e estáveis (figura 2a). O controlo electroquímico deste processo permite a modificação química das caudas alquílicas com a introdução doutras moléculas, como as do fulereno C_{60} , dando lugar ao desenvolvimento de diferentes tipos de sensores. Por outro lado, a electro-oxidação de compostos fenólicos adsorvidos em eléctrodos de metais nobres é uma das técnicas possíveis para combater a poluição.

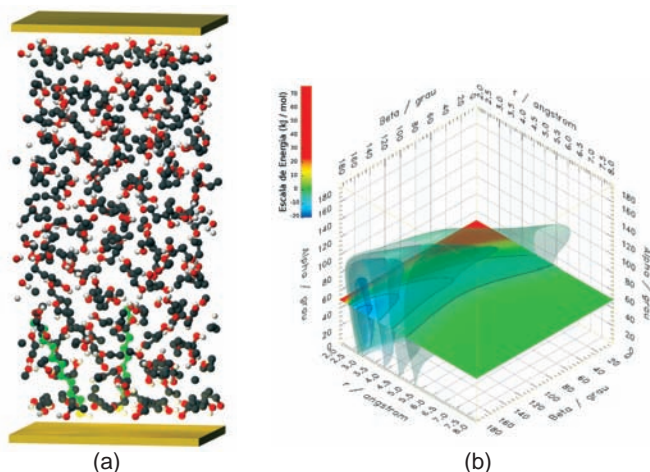


Figura 2 – (a) Um passo na adsorção e automontagem sobre eléctrodos de ouro de moléculas de decanotiol (a verde) dissolvidas em etanol; (b) superfície de energia potencial do etanol-ouro

O grupo de Fernando Fernandes [11] tem realizado simulações computacionais dos mecanismos envolvidos nestes processos, em colaboração com grupos experimentais de electroquímica interfacial, utilizando uma conjugação de métodos quânticos e de Monte Carlo. Este método é, em muitos aspectos, equivalente ao de dinâmica molecular, mas em vez de calcular as trajectórias das partículas deterministicamente, segundo a lei de Newton, faz uma amostragem estocástica (um processo estocástico caracteriza uma evolução sujeita às leis da probabilidade) das posições e/ou das velocidades.

Estes problemas, e outros do domínio da ciência dos materiais, interacções moleculares e reactividade, têm tido contribuições de mais grupos como o de Ferreira Gomes [12].

Sublinhe-se que a mecânica quântica está sempre subjacente nos métodos da química computacional, embora muitas vezes de forma não explícita. Estruturas atómicas, moleculares e nucleares, espectroscopia, campos de forças aproximados para dinâmica molecular e Monte Carlo, e superfícies de energia potencial (figura 2b) para o estudo de interfaces e reacções químicas, por exemplo, têm invariavelmente o suporte quântico. Neste contexto, o grupo de António Varandas [13] tem feito desenvolvimentos seminais da química quântica, e dos respectivos métodos computacionais, com diversas aplicações, em particular à química atmosférica. Entre outros, os grupos de Benedito

Cabral [14] e de Prates Ramalho [15], também se têm dedicado à simulação quântica de matéria condensada (sólidos, fluidos e clusters).

REDES NEURONAIS E PREVISÃO DE ESPECTROS DE RMN

A ressonância magnética nuclear (RMN) é uma técnica espectrométrica utilizada em todos os ramos da química, na indústria e em medicina. Fundamenta-se no facto dos prótons e neutrões dos núcleos atómicos terem spins (grosseiramente, movimentos de rotação) que originam campos magnéticos intrínsecos, os quais podem entrar em ressonância com campos magnéticos aplicados externamente. Os núcleos dos átomos duma molécula estão rodeados de electrões que exercem um efeito de blindagem aos campos externos aplicados. É este efeito que torna a RMN útil para a identificação de estruturas moleculares, uma vez que a blindagem depende da distribuição electrónica em torno de cada núcleo, a qual determina as várias ligações químicas das moléculas. Assim, as frequências de ressonância nucleares são diferentes conforme as vizinhanças dos núcleos de uma dada molécula. Essas diferenças designam-se por *desvios químicos*, relativamente a um padrão, por exemplo, o tetrametilsilano (TMS). A técnica contempla vários núcleos como ^1H (protão), ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F e ^{31}P .

Quando se sintetiza uma molécula nova é necessário comprová-lo. Será então da maior importância prever antecipadamente o seu espectro, por exemplo de RMN, e depois compará-lo com o obtido experimentalmente. Tal é possível com programas de redes neuronais. Esses programas aprendem com exemplos de espectros de diferentes tipos de moléculas conhecidas. Uma vez ensinados, podem prever, com grande fiabilidade, os espectros de moléculas novas. Por exemplo, o programa SPINUS, desenvolvido no grupo de Aires de Sousa [16] para espectros de RMN de protão e disponível em [17]. Tudo o que o utilizador tem de fazer é desenhar a molécula que pretende com a interface gráfica incluída e, depois, com um simples clique obtém o espectro em termos de desvios químicos (figura 3).

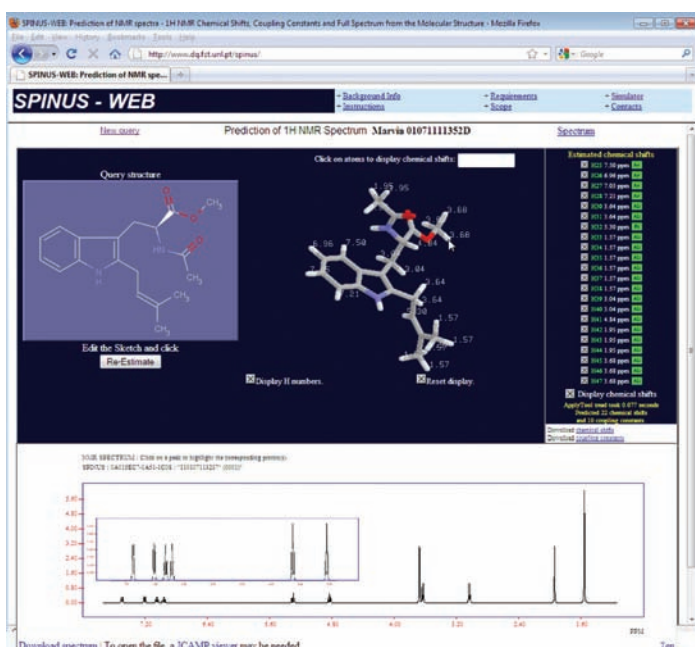


Figura 3 – Interface do programa SPINUS com as estruturas de uma molécula (2D e 3D) e espectro de RMN de prótão (com detalhes de estrutura fina)

Cada sinal do espectro corresponde a um átomo de hidrogénio do composto com vizinhanças diferentes. Além dos desvios químicos, são também calculados os acoplamentos spin-spin de núcleos adjacentes, responsáveis pela estrutura fina dos espectros.

Uma outra aplicação é a elucidação estrutural, ou seja, a dedução da estrutura de um composto novo a partir de dados espectroscópicos experimentais. Vários programas com este objectivo incorporam previsões de espectros, como as do SPINUS, para filtrar entre as diferentes estruturas-candidato possíveis.

O grupo referido tem desenvolvido, também, outras aplicações dos métodos de inteligência artificial, entre elas, a distribuição geográfica de amostras petrolíferas, classificação de reacções enzimáticas à escala genómica e, particularmente Diogo Latino [18], ajustes não paramétricos de superfícies de energia potencial intermolecular.

DINÂMICA DE PROTEÍNAS, DENDRÍMEROS E LÍPIDOS

A visualização molecular é um recurso indispensável, em particular para moléculas cruciais nas estruturas celulares e processos biológicos. Complementa os cálculos, detecta pormenores que poderiam ficar escondidos e sugere novas experiências. Por exemplo:

A lisozima é uma proteína enzimática (existe na clara dos ovos de galinha, leite humano, saliva, etc.), fazendo parte do sistema imunitário natural. Sendo uma forma natural de protecção a bactérias como a *Salmonella*, *E.coli* e *Pseudomonas*, a sua deficiência na alimentação, em especial dos recém-nascidos, tem sido associada a bronco-pneumonias e diarreias.

As interações entre os grupos funcionais do fosfolípido cardiolipina (CL) resultam em conformações moleculares que se sugerem ser determinantes para o bom funcionamento da membrana interna do mitocôndrio, estando a deficiência de CL associada ao síndrome de Barth.

Os dendrímeros são moléculas poliméricas cuja arquitectura é caracterizada por ramos sucessivos, por vezes aproximadamente esféricos, que lhes conferem as designações de dendrímeros de 1^a, 2^a, 3^a,... gerações. Existem diferentes famílias de dendrímeros que embora com a mesma arquitectura se distinguem, essencialmente, pelos tipos de monómeros (as unidades básicas dum polímero).

Têm semelhanças com as proteínas, na medida em que são moléculas poliméricas e, no caso dos dendrímeros peptídicos (uma família que tem tido um crescente desenvolvimento desde 2005), os respectivos monómeros são

aminoácidos, tal como nas proteínas. Relativamente a estas, é de destacar a sua grande flexibilidade molecular.

As aplicações dos dendrímeros são variadas e promissoras, como em bioquímica, nanomedicina e indústria. A arquitectura e propriedades químicas destas moléculas torna-as particularmente adequadas para, por exemplo, encapsularem (figura 4) fármacos e genes, transportando-os, respectivamente, para tecidos cancerosos e ADN de células biológicas. Para além da delicada estratégia da técnica, ela possibilita a atenuação dos efeitos de citotoxicidade desses tratamentos.

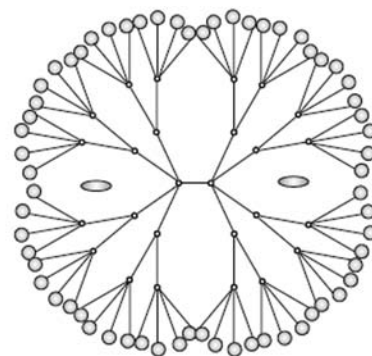


Figura 4 – Esboço de uma “caixa” dendrítica de 3^a geração encapsulando duas moléculas

Filmes, obtidos pelo método da dinâmica molecular, sobre a lisozima, a cardiolipina (em situações diferentes) e de um dendrímero peptídico (onde se observa a sua grande flexibilidade molecular relativamente às proteínas), produzidos pelo grupo de Miguel Machuqueiro, estão disponíveis em [19]. Outros grupos, como os de Cláudio Soares [20] e de António Baptista [21], têm contribuído também para a modelação e dinâmica de proteínas, dendrímeros e aspectos afins.

ACTIVIDADE ENZIMÁTICA E CONCEPÇÃO DE FÁRMACOS

As enzimas são proteínas que catalizam reacções químicas. A maioria dos processos biológicos necessita de enzimas cuja actividade é afectada por outras moléculas, as quais podem actuar como inibidores ou activadores. Muitos fármacos e venenos são inibidores enzimáticos.

Os mecanismos reaccionais, ou seja, o modo como as ligações químicas das moléculas se quebram e formam, dependem directamente da estrutura

electrónica das moléculas. Um passo determinante de qualquer reacção é a formação do chamado complexo activado, isto é, um agregado entre as moléculas dos reagentes com conformações e orientações relativas adequadas para que se obtenham os produtos. Os métodos computacionais quânticos e de docking molecular são os primeiros passos para o esclarecimento de mecanismos enzimáticos, como os envolvidos na concepção de fármacos.

Por exemplo, o vírus HIV-1 da SIDA tem uma actividade enzimática de extrema complexidade. Produz três enzimas: a *integrase* que comanda a integração do seu material genético nas células infectadas, a *transcriptase reversa*, que converte o ARN viral de cadeia simples em ADN de cadeia dupla, pronto para ser integrado no ADN humano, e a *protease* que activa a destruição de proteínas sintetizadas nas células. A concepção de inibidores (figura 5) que combatam esta doença tem tido contribuições do grupo de Maria João Ramos, das quais alguns aspectos, ilustrados com filmes, estão disponíveis em [22].

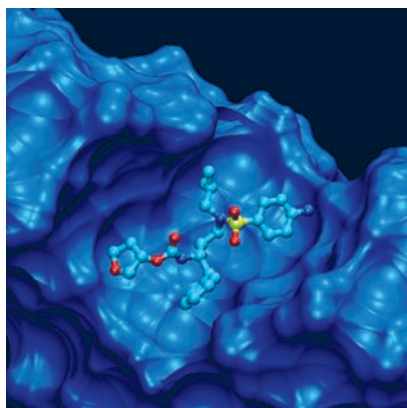


Figura 5 – Um passo da associação de uma molécula com interesse terapêutico à protease do HIV-1

Outros aspectos computacionais no contexto da Bioquímica, e da Química Medicinal e Farmacêutica, também têm sido desenvolvidos por outros grupos, por exemplo, os de Nuno Micaelo [23], Vitor Félix [24], Daniel dos Santos [25] e Nuno Palma [26, 27].

METROLOGIA E QUIMIOMETRIA

Usando computadores e outros instrumentos, ou mesmo uma simples folha de papel e lápis, os investigadores e técnicos determinam valores para diferentes propriedades de sistemas e processos. Ou seja, *realizam sempre medições*, cujas fiabilidade, correcta apresentação e comparações, só podem garantir-se através da definição internacional de sistemas de unidades, da avaliação de incertezas e erros, e da calibração dos instrumentos utilizados. Por outro lado, a saúde, segurança pública e ambiente, exigem normas estritas que regulem as calibrações instrumentais, formulação de produtos e processos industriais. O incumprimento dessas normas na calibração dos altímetros de aviões e na formulação de fármacos ou pesticidas, por exemplo, é desastroso como, infelizmente, e por vezes, se tem verificado.

Estes problemas, de qualquer campo da ciência e tecnologia, são do domínio da *metrologia* (não confundir com meteorologia) que utiliza, em particular, métodos computacionais da quimiometria.

A descrição e a quantificação das espécies químicas envolvidas em equilíbrios químicos múltiplos e a modelação do desempenho metrológico de medições químicas capazes de identificar a origem de divergências inter-

laboratoriais, na avaliação da conformidade dos alimentos em matrizes complexas (figura 6) com a legislação, são exemplos de situações com forte impacto socio-económico que beneficiam de ferramentas computacionais desenvolvidas ou aplicadas para o efeito. Alguns grupos, como o de Filomena Camões [28], têm-se dedicado a problemas destes domínios.

No âmbito da metrologia de calibração instrumental, em particular, um outro grupo é o de Nieto de Castro [29].

COMENTÁRIOS FINAIS

Um texto de divulgação deve evitar, o mais possível, tecnicidades mantendo, no entanto, o rigor científico. Além de uma digressão através dos objectivos, métodos e tipos de programas da Química Computacional, seleccionámos exemplos resumidos da actividade que se desenvolve em Portugal, representativos de algumas vertentes específicas.

Neste contexto, cabe-nos destacar os prémios *Alberto Romão Dias* e *Vicente Seabra* atribuídos, pela Sociedade Portuguesa de Química em 2011 e 2010, respectivamente a Maria José Calhorda [30] da Universidade de Lisboa e a José Richard Gomes [31] da Universidade de Aveiro, em cujos grupos de investigação a Química Computacional desempenha um papel fundamental.

A divulgação científica é um dever cívico, especialmente dos cientistas. Creio que é uma das vias para estimular as gerações mais novas, combater a iliteracia científica e informar os meios sociais dos sucessos (e

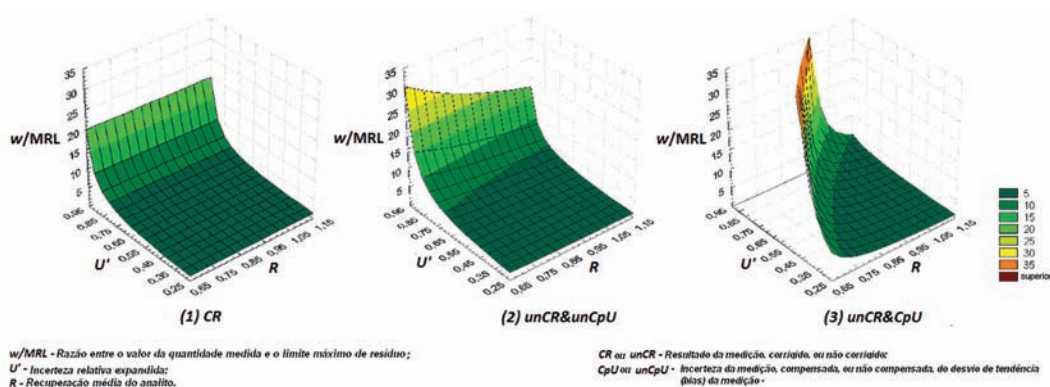


Figura 6 – Modelo da compatibilidade de medições de resíduos de pesticidas em alimentos considerando diferentes convenções de apresentação dos resultados e estimativas da incerteza da medição

também dos insucessos, sublinhe-se) do constante esforço da Ciência em contribuir para o progresso e bem-estar das sociedades. Por muito sigilo que haja numa investigação, existem sempre maneiras de divulgar certos aspectos gerais e técnicas utilizadas, estas por vezes bem conhecidas, mantendo “o grau útil de ignorância” de outrem.

Termino recordando o que disse no início. Qualquer pessoa, curiosa e persistente, pode aprender Química Computacional servindo-se dum vulgar computador ligado à Internet. E, não é exagero afirmar, nem sempre é necessário ser-se especialista numa determinada área para produzir excelentes ideias científicas. Basta ler um pouco de História da Ciência para o confirmar. Aqui fica o desafio, caro leitor.

NOTA: Este artigo também está disponível em versão html, no site da Sociedade Portuguesa de Química (<http://www.spq.pt/publicacoes>) onde os leitores poderão aceder directamente às referências e filmes mencionados.

AGRADECIMENTOS

Aos colegas Pedro Fernandes (Fac. Ciências, Univ. Porto), João Aires de Sousa e Diogo Latino (Fac. Ciências e Tecn., Univ. Nova de Lisboa), Filomena Camões, Ricardo Bettencourt, Miguel Machuqueiro e Pedro Rodrigues (Fac.

Ciências, Univ. Lisboa) pela disponibilização de algumas figuras e filmes, bem como comentários e sugestões sobre o texto. Ao avaliador deste artigo pela crítica e oportunas sugestões.

REFERÊNCIAS

- [1] *Open Source Physics* (<http://www.opensourcephysics.org/>)
- [2] *Wiki Ciências* (<http://wikiciencias.casadasciencias.org/index.php/>)
- [3] “*Using Artificial Intelligence in Chemistry and Biology, A Practical Guide*”, Hugh Cartwright, CRC Press, 2008.
- [4] “*Cinquentenário da Simulação Computacional em Mecânica Estatística I. Os Primeiros passos*”, F. Fernandes, *Química, Bol. SPQ*, 90 (2003) 39-43.
- [5] “*Cinquentenário da Simulação Computacional em Mecânica Estatística II. Desenvolvimento e aplicações fundamentais*”, F. Fernandes, *Química, Bol. SPQ*, 93(2004) 49-60.
- [6] “*Monte Carlo em Mecânica Estatística. Uma explicação simples com argumentos cinéticos*”, F. Fernandes, *Revista Ciência, AEFUL*, Série VII, 2 (2001) 31-39.
- [7] Pedro Rodrigues (http://elixir.dqb.fc.ul.pt/~fsilva/clusters_IYC2010)
- [8] Rui Fartaria (<http://elixir.dqb.fc.ul.pt/~fartaria/home/>)
- [9] CICECO (<http://www.ciceco.ua.pt/>)
- [10] Canongia Lopes (http://cqe.ist.utl.pt/personal_pages/pages/jose_nuno_lopes.php/)
- [11] Fernando Fernandes (<http://elixir.dqb.fc.ul.pt/~fsilva/home/>)
- [12] Ferreira Gomes (<http://www.fc.up.pt/pessoas/jfgomes>)
- [13] António Varandas (<http://www.uc.pt/uid/tcc>)
- [14] Benedito Cabral (<http://gfm.cii.fc.ul.pt/people/bjcabral/>)
- [15] Prates Ramalho (<http://home.uevora.pt/~jpcar/>)
- [16] Aires de Sousa (<http://joao.airesdesousa.com>)
- [17] SPINUS (<http://www.dq.fct.unl.pt/spinus>)
- [18] Diogo Latino (<http://elixir.dqb.fc.ul.pt/~latino/>)
- [19] Miguel Machuqueiro (<http://intheochem.fc.ul.pt/research/artwork.html>)
- [20] Cláudio Soares (<http://www.itqb.unl.pt/~claudio/>)
- [21] António Baptista (<http://www.itqb.unl.pt/~baptista/>)
- [22] Maria João Ramos (<http://www2.fc.up.pt/A-quimica-do-dia-a-dia/>)
- [23] Nuno Micaelo (<http://www.simulation.quimica.uminho.pt/>)
- [24] Vítor Félix (<http://molecular-modeling.dq.ua.pt/>)
- [25] Daniel Santos (http://www.imed.ul.pt/portal/index.php?option=com_content&view=article&id=215&Itemid=80)
- [26] Nuno Palma (<http://www.linkedin.com/in/nunopalma64>)
- [27] Bial (<http://www.bial.com/pt/>)
- [28] Filomena Camões (<http://www.dqb.fc.ul.pt/pessoal/mfcamoes.php>)
- [29] Nieto de Castro (<http://www.dqb.fc.ul.pt/pessoal/cacastro.php>)
- [30] Maria José Calhorda (<http://intheochem.fc.ul.pt/>)
- [31] José Richard Gomes (<http://sweet.ua.pt/~f3963/>)



ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

ENCONTRAR O MERCÚRIO ATRAVÉS DA FLUORESCÊNCIA

Com o intuito de identificar solos e águas contaminadas, sobretudo em países com economias emergentes onde a contaminação por mercúrio oriunda da produção de energia por combustão de carvão é uma preocupação crescente, investigadores da Universidade de Utah, Estados Unidos, desenvolveram um método expedito, económico e que não requer tratamento extensivo da amostra para determinar este metal tóxico.

O método tem como base a ligação específica entre o mercúrio e a timina, base nitrogenada presente em nucleótidos que constituem a cadeia de ADN. A timina é derivatizada com um fluoróforo e, por ligação ao mercúrio, há desactivação da fluorescência. O método desenvolvido permite a detecção de mercúrio até 0,2 partes por bilião, valor correspondente a um décimo do limite considerado como seguro em águas para consumo humano.

Mais detalhes podem ser consultados em <http://www.techventures.utah.edu/news/?p=804>.

(adaptado de http://www.chemweb.com/content/chemist/alchemist_20111014.html)

Marcela Segundo
(msegundo@ff.up.pt)
Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto



UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI

International Workshop on Ionic Liquids– Seeds for New Engineering Applications 2-3 February 2012, Lisbon, Portugal

The Department of Chemistry and Biochemistry of FCUL in collaboration with the Universitat Rovira i Virgili (URIV), Tarragona, Spain, promote a workshop on the potential applications of Ionic Liquids and their mixtures with other solvents and nanomaterials. It will feature motivation and plenary talks from internationally recognized academic and industrial experts in the field.

Workshop topics

Ionic liquids as heat transfer fluids, commercial applications of Ionic liquids, Nano and Ionanofluids as advanced coolants, as absorption refrigeration and heat pump systems and much more.

Venue

Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Campo Grande, 1749-016 Lisbon, Portugal

Organizing Committee

Carlos Nieto de Castro (DQB-FCUL, Portugal), Alberto Coronas (CREVER, URIV, Spain), S M Sohel Murshed (CCMM-FCUL, Portugal), Daniel Salavera (CREVER, URIV, Spain), Luís Paulo Rebelo (ITQB, UNL, Portugal), Maria J. V. Lourenço (DQB-FCUL, Portugal), Joan Carles Bruno (CREVER, URIV, Spain), Fernando J. V. Santos (DQB-FCUL, Portugal)



Information www.dqb.fc.ul.pt/wils2012

This workshop is an event of the NARILAR European Project-New Working Fluids based on Natural Refrigerants and Ionic Liquids for Absorption Refrigeration

Supports



1911-2011
100 ANOS

DOS QUÊS AOS PORQUÊS NO ENSINO DA QUÍMICA

VICTOR M. S. GIL*

Reconhecido que um ambiente de interrogação, procura e questionamento, é condição indispensável a uma verdadeira educação em ciência – aliás, dando cumprimento à curiosidade espontânea da infância – cedo se impõe distinguir os “quês” (incluindo o “quando”, o “quanto”, o “onde”, o “quem”, ...) dos “para quês”, dos “comos”, dos “porquês” e, eventualmente, dos “e se”, que desempenham um papel central no avanço do conhecimento do mundo através da ciência. Tal como sucede com processos e conteúdos, ou competências e conhecimento, “porquês” e “quês” estão, normalmente, enlaçados, neste caso em cascatas de aprendizagem conceptual em que a resposta a uma primeira pergunta gera nova pergunta, e assim sucessivamente. Isto é assim no caso específico da Química, culminando na invocação de dois conceitos fundamentais – energia e probabilidade – por sua vez intimamente enlaçados, quer na Mecânica Quântica, quer na Termodinâmica e na Cinética Química.

É, também, importante distinguir entre “porquês fundamentais” e “porquês operacionais”, aqui tomados no sentido de “como se sabe, como se justifica, como se interpreta...”. Exemplos em Química: aplicação de tabelas de dados, uso do princípio de Le Chatelier, correlações electroquímicas. É, também, essa distinção que permite evitar atribuir capacidade explicativa a modelos teóricos que, não sendo na verdade explicativos, possuem um elevado poder preditivo, por isso muito úteis. São exemplos populares modelos de ligação química e de geometria molecular.

Tudo isto tem subjacente uma taxonomia de perguntas, aqui ilustrada com exemplos da Química.

A CURIOSIDADE NO TOPO

Qualquer que seja a posição assumida ou a prática havida quanto aos métodos e contextos de ensino e aos processos de aprendizagem em ciência, a existência de um ambiente de indagação – “inquiry-based learning” – constitui uma condição indispensável a uma verdadeira educação em ciência, ou, se quisermos, a uma verdadeira literacia científica que, apoiada na erudição, adquira a dimensão de cultura e cidadania.

Trata-se de um espírito de interrogação, procura e questionamento, genuíno e adequado a cada idade, semi-guiado e construído sobre a resposta primordial à curiosidade genética da criança que, brincando, é um pequeno investigador “sob tutela”, sobretudo na busca de afectos e emoções. Esta preocupação permeia algumas publicações recentes a que o autor está

associado no âmbito da educação e comunicação em ciência [1, 2].

Suavizados os afrontamentos entre as variadas metodologias de ensino-aprendizagem [3] – das essencialmente transmissivas, ao dito “ensino por pesquisa” (numa fórmula recente, rica e ambiciosa) [4], passando por algumas interpretações abusivas e utópicas da chamada “aprendizagem por descoberta”, pelas abordagens CTS (por vezes obsessivamente pragmáticas), enfim, com mais ou menos considerações construtivistas ou socio-construtivistas – é ainda mais urgente desenhar e pôr em prática mecanismos que contrariem o escândalo que é o decréscimo generalizado da curiosidade da maioria das crianças e jovens ao longo do percurso escolar.

Há muito que se justifica um movimento pró-curiosidade que aproxime escolas e famílias e que concentre o empenhamento de especialistas, fundações, empresas, administração central e local, ...

PERGUNTAS EM CASCATA

A curiosidade – desinteressada ou com objectivo prático à vista – exprime-se através de diferentes tipos de perguntas. São os “quês” (incluindo o “quando”, o “quanto”, o “onde”, o “quem”, ...), os “para quês”, os “comos”, os “porquês” e, eventualmente, os “e se”, os quais desempenham um papel central no avanço do conhecimento do mundo através da ciência.

Aprender, desde cedo, a distinguir estes diferentes tipos de perguntas corresponde a desenvolver capacidades reflexivas e meta-cognitivas que só pode reforçar a qualidade da educação, ajudando a disciplinar a curiosidade mais ou menos espontânea. Por exemplo, enquanto os “comos” visam, sobretudo, a origem do conhecimento e a primeira compreensão e interpretação dos “quês”, são os “porquês” que abrem a porta à explicação e que, juntamente com os “e se”, fazem avançar a compreensão e a criatividade.

* Departamento de Química, FCTUC, e Exploratório Ciência Viva, Coimbra
E-mail: vgil.explora@mail.telepac.pt

Ora, tal como não há processos sem conteúdos, nem competências sem conhecimento, também não há “porquês” sem “quês” (e o inverso também é verdadeiro), frequentemente enlaçados em cascatas de aprendizagem conceptual em que a resposta a uma primeira pergunta gera nova pergunta, e assim sucessivamente. Isto é assim no caso específico da Química, culminando na invocação de dois conceitos fundamentais – energia e probabilidade – por sua vez intimamente enlaçados, quer na Mecânica Quântica, quer na Termodinâmica e na Cinética Química.

Recorde-se que a Química desenvolve-se sobretudo à volta de “quês”, “comos” e “porquês” sobre a natureza, propriedades e transformações da matéria, interpretadas em termos de átomos e suas associações. Eis alguns exemplos:

“QUÊS”

- Qual é o metal menos denso?
- Qual é o átomo maior?
- Quais os elementos halogéneos?
- Qual é o átomo mais leve?
- O que são gases nobres?
- Quem descobriu o oxigénio?
- Quando foi descoberto o fósforo?
- Quantos grupos tem a Tabela Periódica?

“COMOS”

- Como se sabe que o silício é um semicondutor?
- Como é que pode haver átomos mais pesados mas mais pequenos que outros?
- Como é que o oxigénio e o enxofre pertencem ao mesmo grupo da Tabela Periódica, surgindo em estados físicos diferentes?

“PORQUÊS”

- Por que razão o sódio reage vivamente com a água?
- Porque é que o hélio é menos denso que o ar?
- Porque é que o néon é pouco reactivo?
- Porque é que os átomos mais leves são semelhantes se tiverem números atómicos que difiram de 8?

“E SE”

- E se as moléculas de água se tornassem lineares, com os átomos todos em linha?

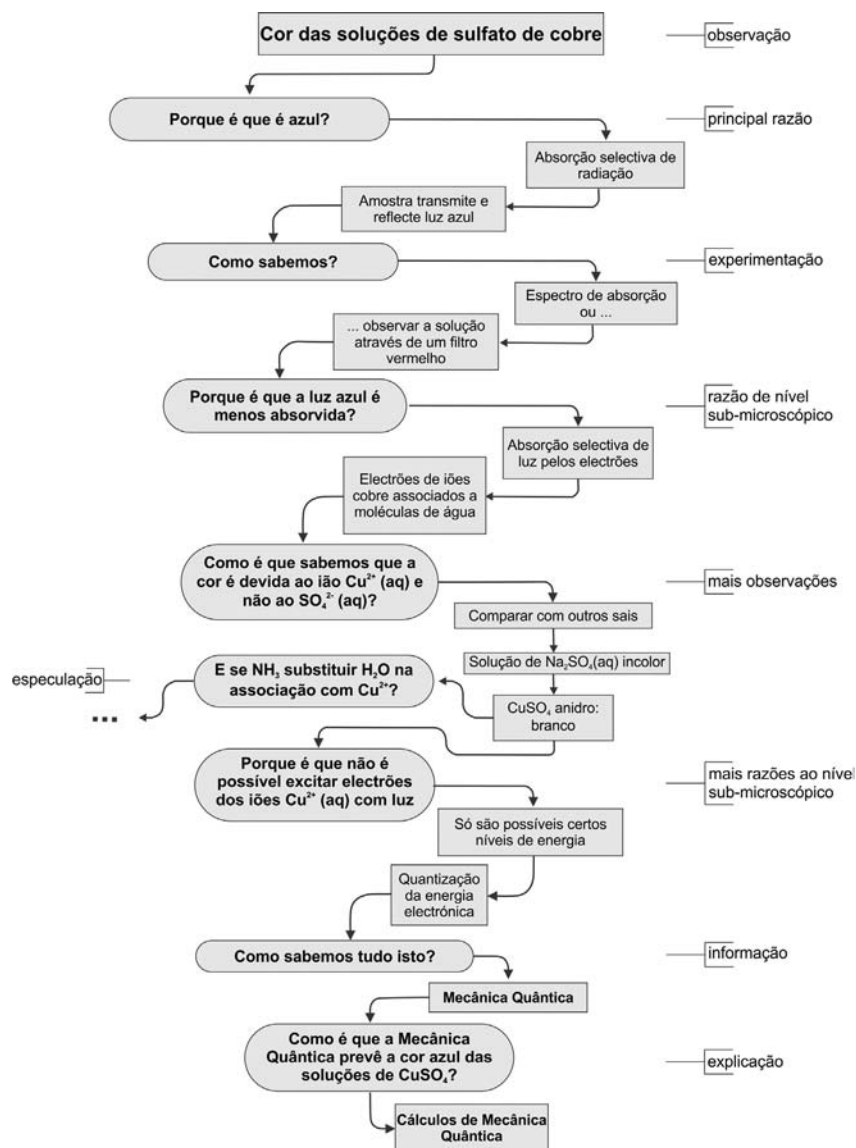


Figura 1 – Um exemplo de cascata de “quês”, “comos” e “porquês”

A Figura 1 mostra uma cascata de perguntas à volta de um exemplo simples: a cor azul das soluções aquosas de sulfato de cobre [5]. Depois do facto, surge o primeiro “porquê” – que apela à razão mais próxima – seguido do primeiro “como” – que clama por experimentação – mais um “porquê” – em busca da primeira razão a nível sub-microscópico – mais observação, uma derivação especulativa com um “e se”, um novo “porquê” mais profundo, mais um “como” fundamental que termina na Mecânica Quântica. Mas não é o fim, já que a Mecânica Quântica encerra “porquês” ainda mais fundamentais.

Igualmente se desaguaria na Mecânica Quântica, tivesse o problema inicial sido sobre a solubilidade do sulfato de

cobre em água em comparação, por exemplo, com a do sulfato de bário. Neste caso, as fases intermédias da cascata envolveriam o conceito de probabilidade, relacionado com entropia e a 2ª Lei da Termodinâmica, associado aos conceitos de energia de rede e energia de hidratação.

UMA TAXONOMIA DE PERGUNTAS

Segundo a literatura [6-15], as perguntas podem ser organizadas em duas grandes classes:

- A. Perguntas de **índole cognitiva**, que requerem uma resposta, focadas em conhecimento: *Que, Quem, Quando, Onde, Como, Quanto, Quantos, Porquê...*
- B. Perguntas de **índole não-cognitiva**, que procuram autorização,

apontam para um comportamento não-verbal, exprimem uma opinião, etc.: *Posso entrar? Pode passar a água? Quem diria? etc.*

Por sua vez, as perguntas A podem ser divididas em várias categorias:

A1. Aquisição de informação (simples ou complexa, qualitativa ou quantitativa).

A2. Processamento de informação (descrição, comparação, integração, reconciliação, correlação, procura de padrões, relações causa-efeito, previsão, generalização, aplicação, resolução de problemas).

A3. Pensamento crítico e criativo (colocação de hipóteses, especulação, explicação, validação de explicação).

A4. Organização e reflexão sobre todo o processo de procura de sentido (por ex. Em que ponto estamos? Que tipos de perguntas estamos a considerar?).

As categorias A1, A2 e A3 podem, ainda, ser sub-divididas como se ilustram nas Tabelas 1, 2 e 3. Na categoria A3, distinguem-se duas importantes sub-categorias, como se mostra na Tabela 3.

Tabela 1 – Sub-divisões da categoria A1

A1. Aquisição de informação	
A1.1 Questões fechadas, de resposta breve	
Questões de verdadeiro/falso, sim/não ou disjuntivas	No equilíbrio, a massa de produtos é igual à massa de reagentes. $aA + Bb \rightleftharpoons cC + dD$ Verdadeiro ou Falso? Em igualdade de condições, qual é mais solúvel em água: cloreto de sódio ou carbonato de cálcio?
Questões focadas em seres, objectos, tempo, locais, ...	Quem descobriu o oxigénio? Quando foi descoberto o fósforo? Quantos grupos tem a Tabela Periódica? Onde (em que país) nasceu Henri Le Chatelier? Quais os elementos halogéneos?
Questões focadas num atributo	Qual é o metal menos denso? Qual é o átomo maior? Qual é o átomo mais leve? Quantas vezes a molécula N_2 é mais pesada que H_2 ?
A1.2 Questões abertas, de resposta mais elaborada	
Questões focadas na causa próxima ou consequência de um evento ou acção	Qual é a principal causa das chuvas ácidas? Qual o efeito do aumento de temperatura no estado de equilíbrio de uma reacção exotérmica?
Questões sobre a ocorrência ou não ocorrência de um determinado evento/acção	Como se pode usar o efeito de ião-comum para diminuir a solubilidade do carbonato de cálcio? Que condições favorecem a corrosão metálica?
Questões que apelam a uma clarificação, semelhanças/diferenças, definição, ...	O que são gases nobres? Qual a diferença entre reacção extensa e reacção rápida? Porque é que se atribui o valor 7 ao pH da água, a 25°C?
Questões que têm a ver com aplicações práticas	Para que servem os catalisadores, se eles não alteram as constantes de equilíbrio?
Questões que apelam a uma opinião fundamentada	Que acha da reciclagem das latas de alumínio?

Tabela 2 – Sub-divisões da categoria A2

A2. Processamento de informação	
A2.1 Questões que apelam a cálculo, evidência ou determinação experimental	Qual a solubilidade do fluoreto de cálcio ($K_s = 3,9 \times 10^{-11}$) em água e numa solução aquosa com $0,010 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ de ião cálcio? Como se sabe, por via experimental, que a constante de acidez do ácido acético é $1,8 \times 10^{-5}$? Como se sabe que o silício é um semiconductor?

– continua –

– continuação –

<p>A2.2 Questões que visam comparação, correlação, dedução</p>	<p>Que reactividade se pode prever para o metal alcalino céσιο por comparação com o comportamento dos outros metais alcalinos em posição superior na Tabela Periódica?</p> <p>Como se interpreta o facto de o ouro ser menos oxidável que o ferro em termos de potenciais de eléctrodo?</p> <p>Como se justifica o efeito da pressão no equilíbrio de síntese do amoníaco a partir de nitrogénio e hidrogénio, em termos do princípio de Le Chatelier?</p>
<p>A2.3 Questões que buscam a aplicação de modelos teóricos</p>	<p>Que alteração de cor se pode prever para uma solução aquosa de sulfato de cobre por adição de amoníaco com base no modelo do campo cristalino?</p> <p>Que geometria se prevê para a molécula de dióxido de nitrogénio, com base no modelo da repulsão de pares de electrões de valência?</p>
<p>A2.4 Questões que apelam à aplicação de tabelas de valores</p>	<p>Qual dos ácidos etanóico e benzóico é mais fraco? Justifique a resposta.</p> <p>Qual dos sais carbonato de chumbo e sulfato de chumbo é mais solúvel em água? Justifique a resposta.</p>
<p>A2.5 Questões sobre conflitos com o conhecimento prévio, intuição ou senso comum</p>	<p>Como é que pode haver átomos mais pesados mas mais pequenos que outros?</p> <p>Como é que o oxigénio e o enxofre pertencem ao mesmo grupo da Tabela Periódica, surgindo em estados físicos diferentes?</p> <p>Como é que a adição de um gás inerte ao sistema em equilíbrio</p> $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NH}_3(\text{g})$ <p>não aumenta a proporção de amoníaco, como resultado de um aumento de pressão total (com V e T constantes)?</p> <p>Como é possível que a solubilidade do sulfato de cobre em água seja a mesma, quer se use o sal em bloco ou em pó? Não é verdade que a dissolução é mais rápida se estiver moído?</p> $\text{CuSO}_4(\text{s}) \rightleftharpoons \text{Cu}^{2+}(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$ <p>Como se compreende que o carbonato de cálcio seja menos solúvel em água do que o cloreto de sódio, quando as interações moléculas de solvente/iões do soluto são mais fortes no primeiro caso?</p>

Tabela 3 – Sub-divisões da categoria A3

<p>A3. Pensamento crítico e criativo</p>	
<p>A3.1 Questões que visam as explicações</p>	<p>Por que razão o sódio reage vivamente com a água?</p> <p>Porque é que o hélio é menos denso que o ar?</p> <p>Porque é que o néon é pouco reactivo?</p> <p>Porque é que os átomos mais leves são semelhantes se tiverem números atómicos que difiram de 8?</p> <p>Como se explica que o fluoreto de hidrogénio seja um ácido fraco, ao passo que o cloreto de hidrogénio é um ácido forte?</p> <p>Porque é que o sulfato de magnésio é um sal muito solúvel em água quando o carbonato de magnésio é pouco solúvel?</p>
<p>A3.2 Questões especulativas</p>	<p>E se, em HCl, o isótopo de cloro passar a ser Cl-37 em vez de Cl-35 em todas as moléculas, isso alteraria a acidez da substância?</p> <p>E se, na molécula de paracetamol, o grupo OH for substituído por um grupo SH, o que acontecerá às suas propriedades como analgésico?</p>

PORQUÊS FUNDAMENTAIS E PORQUÊS OPERACIONAIS

Na actividade geradora de compreensão mais profunda, é não só importante identificar as diferentes categorias de perguntas como, no caso dos “porquês”, distinguir entre “porquês operacionais” e “porquês fundamentais”. Aqueles são, aqui, tomados no sentido de “como se sabe, como se justifica, como se interpreta...”, requerendo respostas iniciadas, não por um “porque”, que daria a ilusão de uma

explicação ou de uma relação causal, mas por expressões como “em conformidade com”, mais apropriadas a respostas associadas à aplicação de tabelas de dados (por exemplo, constantes de acidez), à dedução de um caso particular a partir de um princípio geral (por exemplo, o princípio de Le Chatelier), à correlação de factos e/ou variáveis (por exemplo, potenciais de eléctrodo) [16].

Retomam-se alguns dos exemplos da secção anterior.

** Porque é que o ácido acético (etanóico) é mais fraco que o ácido benzóico?*

Invocar diferentes constantes de acidez não proporciona, obviamente, uma explicação. Pouco mais é do que uma tautologia. Podia ser aceitável fosse a pergunta “Como é que se pode saber qual dos ácidos é mais fraco?”. A resposta à pergunta original passa, oportunamente, pela Termodinâmica aliada a considerações estruturais.

** Porque é que o sulfato de magnésio é um sal muito solúvel em água*

enquanto o carbonato de magnésio é pouco solúvel?

Semelhantermente, invocar constantes produto de solubilidade pouco mais é do que uma tautologia, embora, novamente, com uma referência quantitativa. Em vez de uma resposta “porque o produto de solubilidade do carbonato é menor”, apenas podemos dizer, por exemplo, “de acordo com um menor produto de solubilidade no caso do carbonato”, enquanto considerações de entropia e energia não se tornam acessíveis.

** Porque é que o rendimento da síntese do amoníaco $N_2(g) + 3H_2(g) \rightleftharpoons 2NH_3(g)$ é maior quando se comprime a mistura gasosa?*

A explicação não está, é claro, na aplicação do princípio de Le Chatelier: embora este seja uma generalização suportada, quer pela experiência, quer pela teoria, o exemplo acima não é mais do que um caso particular cuja explicação não é obtida por mera dedução do princípio geral. Pode mesmo envolver-se o cociente da reacção e comparar com a constante de equilíbrio, mas, novamente, a resposta passa pela Termodinâmica aliada a considerações estruturais.

** Por que razão o sódio reage vivamente com a água?*

Invocar potenciais de eléctrodo é útil mas constitui apenas uma correlação e não uma explicação, já que não há uma relação de causa-efeito entre o potencial de eléctrodo apropriado e a extensão da reacção: estão ambos relacionados com o valor ΔG° , em Termodinâmica.

Também o uso de tabelas de entalpias de formação é uma forma expedita de calcular o ΔH° de uma reacção (lei de Hess), mas não proporciona uma explicação, nem do sinal, nem do valor desta grandeza.

MODELOS PREDITIVOS E EXPLICAÇÃO

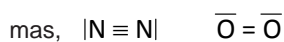
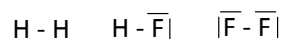
É, também, a frequente confusão entre “porquês” fundamentais e operacionais que conduz à atribuição de capacidade explicativa a modelos teóricos que, não sendo na verdade explicativos, possuem um elevado poder preditivo e uma forma de obter conforto intelectual adicional, por isso

muito úteis. Uma capacidade de predição correcta é uma condição necessária para validar uma teoria, mas não suficiente.

São bons exemplos, em Química, populares modelos de ligação química e de geometria molecular.

a. Ligação covalente e modelo de Lewis

Considere-se, como exemplo, a frase vulgarmente utilizada “Em moléculas covalentes, os átomos partilham electrões de forma a adquirirem a estrutura electrónica de um gás raro”. Daí fórmulas correctas como:



Além, por exemplo, de



E, no entanto ...

CRÍTICA 1

- Em $F - F$, não são partilhados só 2×1 electrões ... mas 2×7 electrões de valência!
- Em N_2 , todos os $2 \times 5 = 10$ electrões de valência são partilhados!
- O que sucede é que, na complexidade das situações, os electrões partilhados não têm todos um efeito favorável à ligação: na linguagem das Orbitais Moleculares, há electrões de valência ligantes e outros anti-ligantes. É o balanço que importa: ordem de ligação 1 em F_2 e ordem de ligação 3 em N_2 .

CRÍTICA 2

- Estabilidade de átomo de gás raro é relativa a ganho, perda ou partilha de electrões (por exemplo, preferência de $Ne + Ne$ sobre Ne_2): átomos inertes.
- Estabilidade de F_2 e N_2 é relativa a $F + F$ ou $N + N$, respectivamente, e não a espécies inertes: N_2 é relativamente estável mas F_2 é muito reactivo.

b. Regra do octeto

Uma extensão do modelo de Lewis é a possibilidade de escrita expedita

de fórmulas de estrutura com base na regra do octeto (átomos do 2º período da Tabela Periódica; duplete, para H): distribuir o número total de traços (metade do total de electrões de valência) à volta dos símbolos atómicos – 1 para H e 4 traços para C, N, O ou F (assemelhando-se, respectivamente, a He e a Ne).

Um dos desenvolvimentos do modelo prende-se com a noção de ordens de ligação fraccionárias e estruturas híbridas (por exemplo, O_3 e C_6H_6).

Trata-se, na verdade, de um modelo simples, muito eficaz do ponto de vista da capacidade preditiva, mas com muito pequena capacidade explicativa.

c. A antiga noção de valência

Uma forma simples de racionalizar e prever ordens de ligação em casos simples, a um nível introdutório, é usar a analogia. Considere-se o seguinte modelo analógico relacionado com a antiga noção de valência e partindo da existência de ligações simples quando estão implicados átomos de hidrogénio:

- O átomo O na molécula H_2O está ligado a 2 átomos, ao passo que em O_2 está ligado só a 1; então, a ligação em O_2 deve “valer” por duas, isto é, $O=O$.
- O átomo N na molécula NH_3 está ligado a 3 átomos, ao passo que em N_2 está ligado só a 1; então, a ligação em N_2 deve valer por três, isto é, $N \equiv N$.
- O átomo C na molécula CH_4 (e em C_2H_6) está ligado a 4 átomos, ao passo que em C_2H_2 está ligado a 2; então, a ligação carbono-carbono em C_2H_2 deve valer por três, isto é $H-C \equiv C-H$. Da mesma forma, as ligações carbono-oxigénio em CO_2 devem valer por duas, isto é, $O=C=O$.
- Em CO , por parte de O a ligação devia ser dupla e, por parte de C, quádrupla; então $C \equiv O$.

É claro que não há uma dimensão explicativa neste modelo, mas apenas uma correcta capacidade de predição com base analógica.

Relacionado com estas considerações e com a regra do octeto, pode

verificar-se (e demonstrar-se analiticamente) [17] que, para qualquer equação química acertada, em que só estejam envolvidas espécies cuja estrutura obedeça à regra do octeto, pode não haver conservação do número de ligações mas há conservação da soma das ordens de ligação ao passar-se de reagentes a produtos. A equação de síntese do amoníaco é um bom exemplo.

d. Geometria molecular e modelo RPEV (repulsão de pares de electrões de valência)

Com relações directas com a regra do octeto na escrita de fórmulas de estrutura, adquiriu grande popularidade o chamado “modelo da repulsão de pares de electrões de valência” (RPEV) em previsões qualitativas e semi-quantitativas no campo da geometria molecular [17-23]. Tal popularidade decorre, não só da eficácia, como da simplicidade operacional do modelo.

É, contudo, irónico que R. Gillespie, o autor mais responsável pelo êxito pragmático do modelo, tenha clamado contra o incorrecto entendimento da base física do modelo: segundo ele, a repulsão em causa não é de natureza coulombiana, como habitualmente é ensinado ou, pelo menos, insinuado, mas associada ao princípio de Pauli, isto é ao spin dos electrões e à anti-simetria das funções de onda!

Mas pode, ainda, acrescentar-se: E as repulsões electrostáticas não contam? E as atracções? Afinal, são elas que justificam a existência de moléculas!

Estas considerações ilustram o facto de que, não obstante a eficácia do modelo – tal como é simplista e pragmaticamente utilizado na previsão de geometrias desconhecidas – o seu teor explicativo não lhe corresponde.

Então, é uma ferramenta útil para o investigador e, no âmbito do ensino, para o professor e, especialmente, para o aluno, não na procura de razões para as variadas geometrias das moléculas (um problema de energia molecular bastante complexo), mas na resposta a perguntas como, por exemplo, “Qual é a geometria do ião nitrito?”. A pergunta “Porque é que o

ião nitrito tem uma geometria angular?” só a um nível muito avançado pode ser encarada. Na aplicação do modelo RPEV, portanto, no campo dos “quês” e não dos “porquês”. Esta é uma razão por que se afigura preferível falar de método e não de modelo.

Uma forma de evitar a confusão entre capacidade preditiva e capacidade explicativa deste método podia ser a de, assumidamente, imaginar que os traços numa fórmula de estrutura se repelem – coisa que, evidentemente, não tem sentido, mas funciona.

Assim, para moléculas ou fragmentos moleculares AX_m , nesta versão ainda mais simplista do método, teríamos os seguintes passos:

1. Considerar a fórmula de estrutura com n traços à volta de A (representando electrões ligantes ou não-ligantes), mas contando ligações múltiplas como um único.
2. Apurar a geometria que maximiza a separação entre os n traços que efectivamente se consideram.
3. Prever pequenas diferenças na geometria, com base em:

- a) Admitir que um par não-ligante exige mais espaço, tal como as ligações múltiplas.
- b) Admitir que numa ligação A–X, maior electronegatividade de X implica menor tamanho do par A–X.

Com esta ferramenta, não só se prevêem correctamente geometrias, como mostra a Tabela 4, como se acomodam pequenas diferenças na mesma molécula ou em moléculas afins. Por exemplo,

- i) A diminuição do ângulo de ligação de CH_4 , para NH_3 e para H_2O pode ser relacionada com a primeira parte do ponto 3a) acima.
- ii) O facto de o ângulo HCH no eteno ser menor do que o ângulo HCC pode relacionar-se com a segunda parte de 3a).

O facto de o ângulo HCH em CH_3Cl ser menor do que em CH_4 prende-se com 3b).

COINCIDÊNCIAS?

A eficácia preditiva de modelos claramente insatisfatórios do ponto de vista da explicação não deixa de ser um

Tabela 4 – Previsões de geometrias moleculares

n	“Traços ligantes/ não ligantes”	Geometria	Exemplos
n=2	2 ligantes	Linear	$BeCl_2, CO_2, HCN$
n=3	3 ligantes	Triangular plana	BCl_3, H_2CO, NO_3^-
	2 ligantes + 1 não ligante	Angular	$GeCl_2, NO_2^-$
n=4	4 ligantes	Tetraédrica	$CH_4, SiCl_4, NH_4^+, PO_4^{3-}$
	3 ligantes + 1 não ligante	Piramidal	NH_3, PF_3, H_3O^+
	2 ligantes + 2 não ligantes	Angular	H_2O
n=5	5 ligantes	Bipiramidal trigonal	PF_5
n=6	6 ligantes	Octaédrica	SF_6

desafio que não pode ser ignorado. Meras coincidências?

Se, por exemplo, a razão de octeto na regra com esse nome decorre de os átomos do 2º período da Tabela Periódica terem 4 orbitais de valência e de o número máximo de electrões por orbital ser 2, uma compreensão satisfatória não dispensa recorrer, por exemplo, à Teoria das Orbitais Moleculares.

Já no caso do modelo RPEV, a situação é bem mais complexa, como mostram os estudos de R. Bader sobre a topologia da densidade de carga electrónica $\rho(r)$ em moléculas [24].

Na verdade, Bader e colaboradores [25] demonstraram que a interpretação física da eficácia do modelo não tem a ver com a topologia da densidade de carga $\rho(r)$ – em especial, as regiões onde $\rho(r)$ é máxima ou mínima – mas com as correspondentes segundas derivadas, isto é, o laplaciano de $\rho(r)$. Este corresponde à ideia de regiões onde a função $\rho(r)$ se diz “localmente concentrada”. A energia total de uma molécula é minimizada para a geometria que maximiza as separações entre tais regiões definidas em termos de $\nabla^2 \rho(r)$. Para uma discussão mais pormenorizada, ver [26].

REFERÊNCIAS

- [1] V. M. S. Gil, “Perguntas de miúdos para graúdos – I”, em *Ciência & Cª*, Exploratório Ciência Viva, Coimbra, (2010).
- [2] V. M. S. Gil, M. Helena Caldeira, “Perguntas de miúdos para graúdos – II”, em *Ciência & Cª*, Exploratório Ciência Viva, Coimbra, (2011).
- [3] V. M. S. Gil, “Olhares Cruzados sobre a educação em ciências – I”, em *Ciência & Cª*, Exploratório Ciência Viva, Coimbra, (2011).
- [4] A. F. Cachapuz, J. Praia, M. Jorge, “Reflexão em torno de perspectivas do ensino das ciências: contributos para uma nova orientação curricular – Ensino por Pesquisa”, vol. IX (2000), 69.
- [5] V. M. S. Gil, J. C. Paiva, “Questions and how to differentiate prediction and explanation in Chemistry teaching and learning”, *J. Chem. Educ.*, **87** (2010), 1324.
- [6] A. C. Graesser, K. Lang, D. Horgan, “A taxonomy for question generation”, *Questioning Exchange* **2** (1988), 3.
- [7] L. W. Anderson, D. R. Krathwohl, (Eds.), “A taxonomy for learning, teaching and assessment: a revision of Bloom’s taxonomy of educational objectives”, Longman, New York, (2001).
- [8] M. H. Pedrosa de Jesus, P. Almeida, M. Watts, “Questioning styles and students’ learning: four case studies”, *Educational Psychology* **24** (2004), 531.
- [9] M. Watts, M. H. Pedrosa, “Enhancing University teaching through the use of questioning”, SEDA (Staff and Educational Development Association Ltd), Special 19, London, UK, (2006), e bibliografia aí citada.
- [10] C. Chin, “Students’ questions: Fostering a culture of inquisitiveness in science classrooms”, *School Science Review*, **86** (2004), (314), 107.
- [11] C. Chin, and J. F. Osborne, “Students’ questions: a potential resource for teaching and learning science”, *Studies in Science Education*, **44** (2008), 1, e bibliografia aí citada
- [12] R. Millar, J. F Osborne, “Beyond 2000: Science education for the future”, King’s College, London, UK, (1998).
- [13] P. Almeida, H. Pedrosa-de-Jesus, M. Watts, “Developing a mini-project: students’ questions and learning styles”, *Psychology of Education Review*, **32** (2008), 6.
- [14] M. Watts, H. Pedrosa-de-Jesus, “Questions and Science” (Chapter 7). In R. Toplis (Ed). *How science works. Exploring effective pedagogy and practice*. London: Routledge (2011), 85.
- [15] D. M. Watts, H. Pedrosa-de-Jesus, “Asking questions in classroom science”. In K. Taber (Ed.) *Science Education for Gifted Learners*. London: Routledge Falmer (2007), 112.
- [16] V. M. S. Gil, “University students assessment of the explanatory content of justification statement”, *Int. J. Sci. Education*, **10** (1988), 581.
- [17] V. M. S. Gil, S. J. Formosinho, A. C. Cardoso, “Bond-orders in molecular chemical reactions and the teaching of multiple bonding”, *Education in Chemistry*, **25** (1988), 11.
- [18] R. J. Gillespie, R.S. Nyholm, *Quart. Rev. Chem. Soc.*, (1957), 339.
- [19] R. J. Gillespie, “Molecular Geometry”, *Van Nostrand Reinhold*, London, (1972).
- [20] R. J. Gillespie, I. Hargitai, “The VSEPR Model of Molecular Geometry”, *Prentice Hall*, London, U.K., (1991), e bibliografia aí citada.
- [21] R. J. Gillespie, “VSEPR method revisited”, *Chem. Soc. Rev.* **21**, (1991), 59.
- [22] R. J. Gillespie, *J. Chem. Educ.*, **81** (2004), 298 e bibliografia aí citada.
- [23] N. V. Sidgwick, H. M. Powell, “Stereochemical types and valency groups”, *Proc. Roy. Soc. London*, **176A** (1940), 153.
- [24] R. Bader, “Atoms in Molecules: a Quantum Theory, in International Series of Monographs on Chemistry”, *Clarendon Press*, UK, (1995), e bibliografia aí citada.
- [25] R. Bader, R. J. Gillespie, P. J. MacDougall, “A Physical basis for the VSEPR molel of molecular geometry”, *J. Am. Chem. Soc.*, **110** (1988), 7329.
- [26] V. M. S. Gil, “Orbitals in Chemistry”, *Cambridge Univ. Press*, UK, (2000).

Vá a www.spq.pt

Torne-se Sócio da Sociedade Portuguesa de Química e beneficie de:

- Pertencer a uma comunidade científica dinâmica;
- Receber o boletim “QUÍMICA”;
- Descontos nos Encontros promovidos pela SPQ;
- Descontos nas publicações da SPQ;
- Protocolos assinados entre a SPQ e outras entidades;
- Participar na promoção da Química;
- Apoiar uma Sociedade Científica.

3PYCHEM

3rd Portuguese Young
Chemists Meeting

9-11th May 2012
FACULDADE DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE DO PORTO



www.spq.pt/gqj/3pychem

3pychem@spq.pt

ANÁLISE DA VERDURA DAS ACTIVIDADES LABORATORIAIS DO 11º ANO DO ENSINO SECUNDÁRIO

DOMINIQUE A. COSTA¹, M. GABRIELA T. C. RIBEIRO^{1,*}
E ADÉLIO A. S. C. MACHADO²

Apresenta-se uma análise da verdura das actividades laboratoriais propostas no programa de Química de 11º ano do Ensino Secundário, usando como instrumento de análise a Estrela Verde (EV), uma métrica de verdura semi-quantitativa, mas holística. A análise revelou que uma parte das experiências pode provocar problemas de segurança e de saúde dos alunos e do ambiente, semelhantemente ao que foi encontrado num estudo anterior sobre o 10º ano. Uma análise conjunta das actividades laboratoriais dos dois anos mostra que a maior parte das experiências apresenta uma verdura limitada, o que releva a importância de incorporar a Química Verde (QV) no ensino da química. Mais pragmaticamente, o estudo permitiu detectar as experiências mais problemáticas que devem ser revistas.

Num artigo anterior [1], avaliou-se a verdura das actividades laboratoriais de química (AL) propostas nos programas em vigor [2] da disciplina de Física e Química do 10º ano A. O presente artigo tem dois objectivos. Primeiro, dar continuidade ao anterior, apresentando a avaliação da verdura das AL do 11º ano, realizada com o mesmo instrumento de avaliação, a Estrela Verde (EV) (“Green Star”, GS), cujos princípios e operação foram descritos anteriormente [1, 3-5].

Um segundo objectivo do artigo é usar globalmente os resultados obtidos nos dois estudos para caracterizar alguns aspectos negativos dos programas em vigor do 10º e 11º anos, em particular, identificar as experiências mais problemáticas que devem ser revistas, alertando os professores que presentemente as realizam para os riscos em jogo; e avançar com sugestões que permitam alterar a postura do ensino da química para a prescrita pelo paradigma ecológico do Desenvolvimento Sustentável, implementado no âmbito daquela ciência pela Química Verde (QV).

AVALIAÇÃO DAS ACTIVIDADES LABORATORIAIS

As actividades laboratoriais avaliadas, a totalidade das actividades propostas

no programa em vigor do 11º ano do Ensino Secundário, são apresentadas nos Quadros 1 e 2, referentes às duas unidades que o constituem.

O trabalho foi realizado como descrito em [1], consistindo, para cada experiência, na construção de uma EV de tantas pontas quantos os princípios dos Doze Princípios da QV (ver Caixa 3 em [6]) relevantes (dez nas experiências de síntese e seis nas outras), sendo o comprimento de cada ponta tanto maior quanto melhor for o cumprimento do respectivo princípio, e cálculo da percentagem de área verde da estrela, tanto mais cheia quanto maior for a verdura, relativamente à área de uma estrela de verdura máxima – Índice de Preenchimento da Estrela (IPE). Quanto maior for o valor de IPE, maior será a verdura, cem para a estrela de verdura máxima e zero para a estrela de verdura mínima.

A informação acerca dos riscos para a saúde e para o ambiente, inflamabilidade, reactividade, etc., dos reagentes envolvidos é apresentada na Tabela 1. Os reagentes classificados de degradáveis foram-no com base nas informações recolhidas nas fichas de dados de segurança de produtos químicos (MSDS) da Merck [7]. Quando o programa indica a utilização de materiais do quotidiano, foram escolhidos materiais que continham na embalagem a indicação de que são biodegradáveis. Nas actividades em

que se usam soluções aquosas de sais, consideraram-se as soluções como reagentes, partindo do princípio que foram preparadas previamente. Na actividade AL 2.5 consideraram-se os solventes como reagentes, e não como substâncias auxiliares, porque em parte das experiências são usados alternativamente, não só como solventes, mas também como solutos. Quando o programa indica a concentração das soluções, essa foi a considerada na classificação dos riscos, quando é omissa consideraram-se concentrações que minimizassem os riscos envolvidos, sem afectar a realização da actividade com os objectivos propostos. Por exemplo, na actividade AL 1.1 o programa não indica a concentração das soluções de amoníaco e de hidróxido de sódio e o sal de amónio a utilizar. Verificou-se experimentalmente que era possível usar soluções de hidróxido de sódio 0,1 mol dm⁻³ e de amoníaco a 5% m/m e utilizou-se o acetato de amónio, atendendo ao baixo risco deste composto. Com os dados obtidos, construiu-se uma tabela de pontuação dos Princípios da QV [1] relevantes para cada experiência para construir a respectiva EV. Utilizou-se a EV simplificada (seis pontas) [1] para todas as actividades, excepto para a AL1.2 (síntese do sulfato de tetraaminacobre (II) monoidratado) que envolve uma síntese, pelo que exige uma estrela de dez pontas [3]. Nas figuras 1 e 2 apresentam-se as EV para cada uma das experiências avaliadas.

¹ REQUIMTE, Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, R. Campo Alegre, 687, Porto 4169-007

² Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, R. Campo Alegre, 687, Porto 4169-007

* E-mail: gribeiro@fc.up.pt

AL 1.1 – Amoníaco e compostos de amónio em materiais de uso comum

Identifica-se a presença de amoníaco e compostos de amónio através de testes químicos específicos.

Teste A – Identificação pela formação de cloreto de amónio sólido na reacção com cloreto de hidrogénio.

Teste B – Identificação pelo carácter alcalino de uma solução de amoníaco em água.

Teste C – Identificação por reacção com o reagente de Nessler.

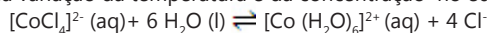
Teste D – Identificação pela formação do ião complexo tetraaminocobre(II), de cor azul intensa.

AL 1.2 – Síntese do sulfato de tetraaminocobre(II) monohidratado

Procede-se à síntese de sulfato de tetraaminocobre(II) monohidratado a partir da reacção química entre soluções aquosas de amoníaco e de sulfato de cobre pentahidratado, usando etanol como solvente.

AL 1.3 – Efeitos da temperatura e da concentração na progressão global de uma reacção

Estuda-se o efeito da variação da temperatura e da concentração no equilíbrio homogéneo:



Actividade 1 – Efeito da variação da temperatura

Aquecimento em banho de água e arrefecimento em banho de gelo.

Actividade 2 – Efeito da variação da concentração

- Adição de água.
- Adição de ácido clorídrico concentrado.
- Adição de cloreto de cobalto(II) hexahidratado.

AL 2.1 – Ácido ou base: uma classificação de alguns materiais

Actividade 1 – Classificação de águas e de outras soluções aquosas em ácidas, neutras ou alcalinas

Procede-se à classificação de águas e de outras soluções aquosas em ácidas, neutras ou alcalinas, utilizando processos de avaliação qualitativa com recurso a indicadores (em solução ou impregnados em papel):

- fenolftaleína; **b)** azul de bromofenol; **c)** tornesol; **d)** carmim de índigo; **e)** indicador universal; **f)** alaranjado de metilo; e **g)** vermelho de metilo.

Actividade 2 – Medição do pH de uma solução

Procede-se à leitura do valor de pH utilizando um medidor de pH electrónico ou um sensor.

Actividade 3 – Apreciação do efeito da temperatura no pH de uma solução

Procede-se à leitura do valor de pH, utilizando um medidor de pH electrónico ou um sensor, às temperaturas ambiente e de 60°C.

AL 2.2 – Chuva “normal” e chuva ácida

Actividade 1 – Verificar a variação do pH da água quando se faz borbulhar CO₂ ou SO₂

- Produção de CO₂ (através da reacção entre ácido clorídrico e carbonato de cálcio).
- Produção de SO₂ (através da reacção entre sulfito de sódio e ácido sulfúrico).

Actividade 2 – Força relativa de ácidos e concentração das soluções respectivas

- Procede-se à adição de vários volumes de um ácido forte a vários tipos de água e mede-se o respectivo pH:
 - ácido clorídrico; e **b)** ácido nítrico.
- Procede-se à adição de vários volumes de um ácido fraco (ácido acético) a vários tipos de água e mede-se o respectivo pH.

AL 2.3 – Neutralização: uma reacção de ácido-base

Actividade 1 – Titulação ácido forte – base forte utilizando um indicador

Procede-se à titulação de ácido sulfúrico com solução de hidróxido de sódio, utilizando um indicador, e calcula-se a concentração desconhecida do ácido: **a)** solução alcoólica de fenolftaleína; e **b)** vermelho de metilo.

Actividade 2 – Titulação ácido forte – base forte utilizando um medidor de pH

Procede-se à titulação de ácido sulfúrico com solução de hidróxido de sódio, utilizando um medidor de pH electrónico ou um sensor, traça-se a curva de titulação e calcula-se a concentração desconhecida do ácido.

AL 2.4 – Série electroquímica: o caso dos metais

Procede-se ao contacto de quatro metais (M = Cu, Zn, Al, Mg) com soluções aquosas de nitratos contendo os catiões dos outros metais e verifica-se se há ocorrência de reacção química: **a)** Cu/Zn(NO₃)₂ (aq); **b)** Al/Zn(NO₃)₂ (aq); **c)** Mg/Zn(NO₃)₂ (aq); **d)** Zn/Cu(NO₃)₂ (aq);

- Al/Cu(NO₃)₂ (aq); **f)** Mg/Cu(NO₃)₂ (aq); **g)** Mg/Al(NO₃)₃ (aq); **h)** Cu/Al(NO₃)₃ (aq); **i)** Zn/Al(NO₃)₃ (aq); **j)** Cu/Mg(NO₃)₃ (aq);

- Zn/Mg(NO₃)₂ (aq); e **l)** Al/Mg(NO₃)₂ (aq)

AL 2.5 – Solubilidade: solutos e solventes

Actividade 1 – Solubilidade de diferentes sais em diferentes solventes

Solutos: **a)** cloreto de sódio; **b)** cloreto de cálcio; **c)** carbonato de cálcio; **d)** iodo; **e)** heptano; **f)** etanol; e **g)** hexano.

Actividade 1.1 - Solvente: água. Actividade 1.2 - Solvente: etanol. Actividade 1.3 - Solvente: hexano.

Actividade 2 – Influência da temperatura na solubilidade de um soluto num solvente

Traça-se a curva de solubilidade do nitrato de potássio em água, em função da temperatura.

AL 2.6 – Dureza da água e problemas de lavagem

Actividade 1 – Avaliação da dureza da água

Adiciona-se detergente, sabão e champô a diferentes tipos de água e avalia-se a dureza da água através da espuma e escuma formadas.

Tipos de água: **a)** água dura preparada juntando cloreto de cálcio a água destilada; **b)** água dura preparada juntando sulfato de magnésio a água destilada; e **c)** água destilada usada como água macia.

Actividade 2 – Avaliação da dureza da água amaciada

Adiciona-se carbonato de sódio à água dura, diminuindo a concentração de iões Ca^{2+} ou Mg^{2+} por precipitação na forma de carbonatos, e avalia-se a dureza da água. Tipos de água: **a)** água dura preparada juntando cloreto de cálcio a água destilada; e **b)** água dura preparada juntando sulfato de magnésio a água destilada.

Tabela 1 – Riscos para a saúde, ambiente e de acidente de todas as substâncias envolvidas

Reagentes	Actividade	Símbolos	Pontuação de riscos para/de		
			Saúde	Ambiente	Acidente
Ácido acético ² (solução – 0,1 mol dm ⁻³)	AL2.2(2B)	-	1	1	1
Acetato de amónio	AL1.1	-	1	1	1
Acetato de sódio (aq)	AL1.1(A, B, D)	-	1	1	1
Ácido clorídrico (solução concentrada)	AL1.1(A); AL1.3	C	3	1	3
Ácido clorídrico (solução - 1 mol dm ⁻³)	AL2.2(1a)	Xi	2	1	2
Ácido clorídrico (solução – 0,1 mol dm ⁻³)	AL2.2(2Aa)	Xi	2	1	2
Ácido nítrico (solução – 0,1 mol dm ⁻³)	AL2.2(2Ab)	Xi	2	1	2
Ácido sulfúrico (solução – 0,05 mol dm ⁻³)	AL2.3	-	1	1	1
Ácido sulfúrico (solução - 2 mol dm ⁻³)	AL2.2(1b)	Xi	2	1	2
Adubo fertilizante de plantas	AL1.1	-	1	1	1
Água ^{1,2}	AL1.3(2a); AL2.1; AL2.2; AL2.3; AL2.5(1.1, 2); AL2.6	-	1	1	1
Alaranjado de metilo	AL2.1(1f)	T	3	1	3
Alumínio em folha	AL2.4(b,e,l)	-	1	1	1
Alumínio em pó	AL2.4(g)	F	1	1	3
Amoníaco (solução a 25%)	AL1.2	C, N	3	3	3
Amoníaco (solução a 5%)	AL1.1	-	1	1	1
Amoníaco (gasoso)	AL1.1	T, N	3	3	3
Azul de bromofenol	AL2.1(1b)	-	1	1	1
Carbonato de cálcio ²	AL2.2(1a); AL2.5(1.1c, 1.2c, 1.3c), AL2.6(2a)	Xi	2	1	2
Carbonato de sódio ^{1,2}	AL2.6(2)	Xi	2	1	2
Carbonato de magnésio	AL2.6(2b)	-	1	1	1
Carmim de índigo	AL2.1(1d)	Xn	2	1	2
Champô ²	AL2.6(1)	-	1	1	1
Cloreto de amónio	AL1.1(A)	Xn	2	1	2
Cloreto de cálcio ²	AL2.2(1a); AL2.5(1.1b, 1.2b, 1.3b), AL2.6(1a, 2a)	Xi	2	1	2

– continuação –

Cloreto de cobalto(II) hexaidratado	AL1.3	T, N	3	3	3
Cloreto de sódio ^{1,2}	AL2.5(1.1a, 1.2a, 1.3a); AL2.6(1a, 2a)	-	1	1	1
Cobre em folha	AL2.4(a, h, i)	-	1	1	1
Cobre em pó	AL2.4(d, e, f)	F	1	1	3
Detergente amoniacal	AL1.1	-	1	1	1
Detergente comercial ²	AL2.6	-	1	1	1
Dióxido de carbono ²	AL2.2(1a)	-	1	1	1
Dióxido de enxofre	AL2.2(1b)	T	3	1	3
Estearato de magnésio ²	AL2.6(1b)	Xi	2	1	2
Estearato de cálcio ²	AL2.6(1a)	Xi	2	1	2
Etanol	AL1.2; AL2.5(1.1f, 1.2)	F	1	1	3
Fenolftaleína (solução alcoólica)	AL2.1(1a); AL2.3(1a)	T	3	1	3
Heptano	AL2.5(1.1e, 1.2e, 1.3e)	Xn, F, N	2	3	3
Hexano	AL2.5(1.1g, 1.2f, 1.3)	Xn, F, N	2	3	3
Hidróxido de sódio (solução 0,1 mol dm ⁻³)	AL1.1(A, B, D); AL2.3	Xi	2	1	2
Indicador universal	AL2.1(1e); AL2.2(1a, b)	F	1	1	3
Iodo	AL2.5(1.1d, 1.2d, 1.3d)	Xn, N	2	3	2
Magnésio, em fita	AL2.4(c, f, g)	F	1	1	3
Nitrato de alumínio	AL2.4(b, e, g, h, i)	Xi, O	2	1	3
Nitrato de cobre	AL2.4(d, e, f)	C, O	3	1	3
Nitrato de magnésio	AL2.4(c, f, g, j, k, l)	Xi, O	2	1	3
Nitrato de potássio	AL2.5(2)	O	1	1	3
Nitrato de zinco	AL2.4(a, b, c, d)	Xn, O	2	1	3
Papel vermelho de tornesol	AL1.1(B)	-	1	1	1
Reagente de Nessler	AL1.1(C)	T ⁺ , N	3	3	3
Sabão para lavagem manual ²	AL2.6	-	1	1	1
Solução tampão calibração pH=10 (Hanna)	AL2.1(2, 3), AL2.2, AL2.3(2)	-	1	1	1
Solução tampão calibração pH=4 (Hanna)	AL2.1(2, 3), AL2.2, AL2.3(2)	-	1	1	1
Solução tampão calibração pH=7 (Hanna)	AL2.1(2, 3), AL2.2, AL2.3(2)	-	1	1	1
Sulfato de cobre pentaidratado	AL1.1(D), AL1.2	Xn, N	2	3	2
Sulfato de magnésio	AL2.6(1b, 2b)	-	1	1	1
Sulfato de sódio	AL2.2(1b), AL2.3	-	1	1	1
Sulfato de tetraaminocobre(II)	AL1.1(D), AL1.2	Xi	2	1	2
Sulfito de sódio	AL2.2(1b)	-	1	1	1
Tornesol	AL2.1(1c)	Xn	2	1	2
Vermelho de metilo	AL2.1(1g); AL2.3(1b)	N	1	3	1
Zinco em folha	AL2.4(d, i, k)	-	1	1	1
Zinco em pó	AL2.4(b, c)	N	1	3	1

¹ Renováveis; ² Degradáveis com produtos de degradação inócuos; Xi – irritante, Xn – prejudicial, T – tóxico, T⁺ - muito tóxico, C – corrosivo, O – agente oxidante, F – muito inflamável, F⁺ - extremamente inflamável; N – perigoso para o meio ambiente.

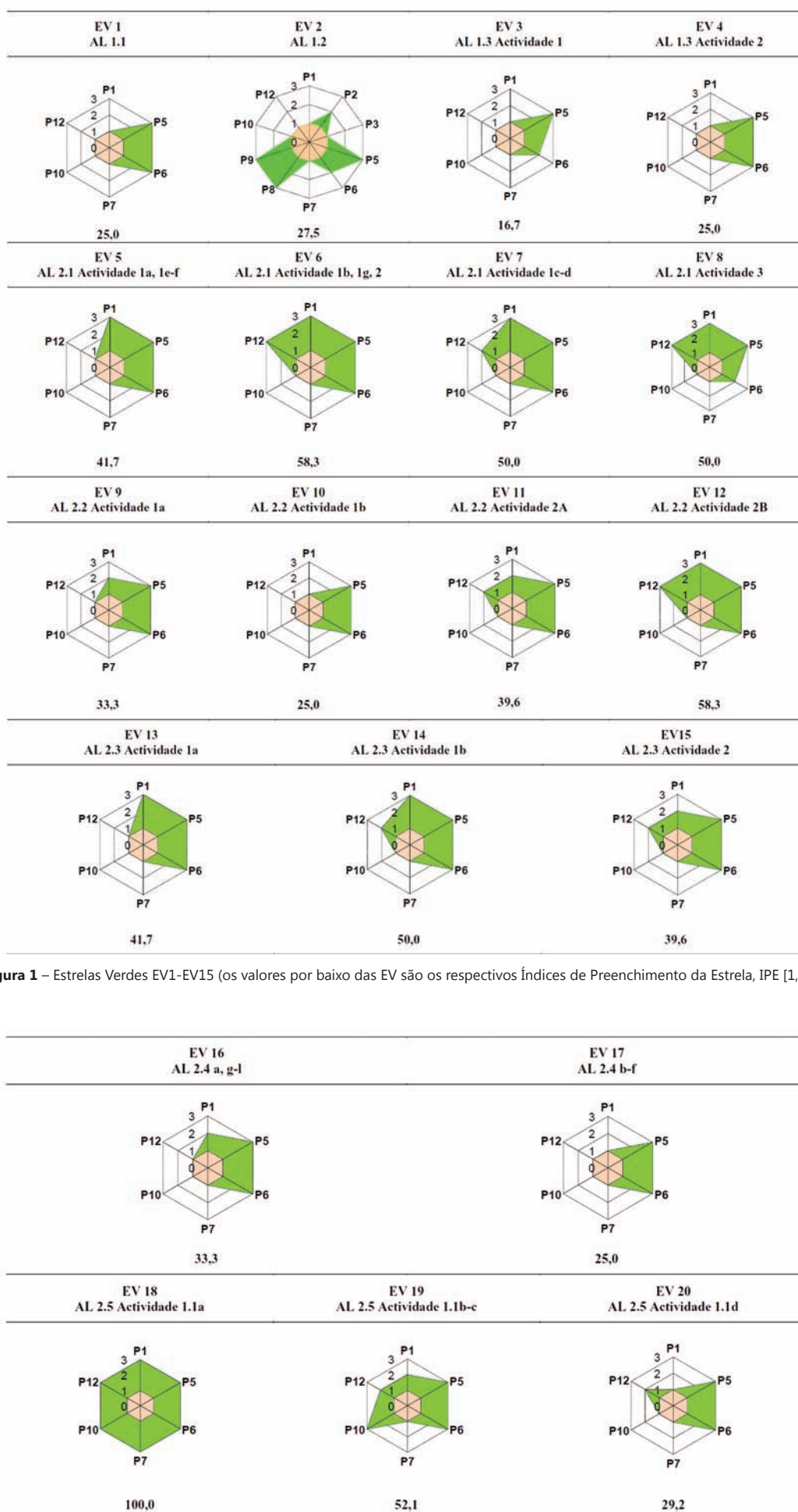


Figura 1 – Estrelas Verdes EV1-EV15 (os valores por baixo das EV são os respectivos Índices de Preenchimento da Estrela, IPE [1, 3-5])

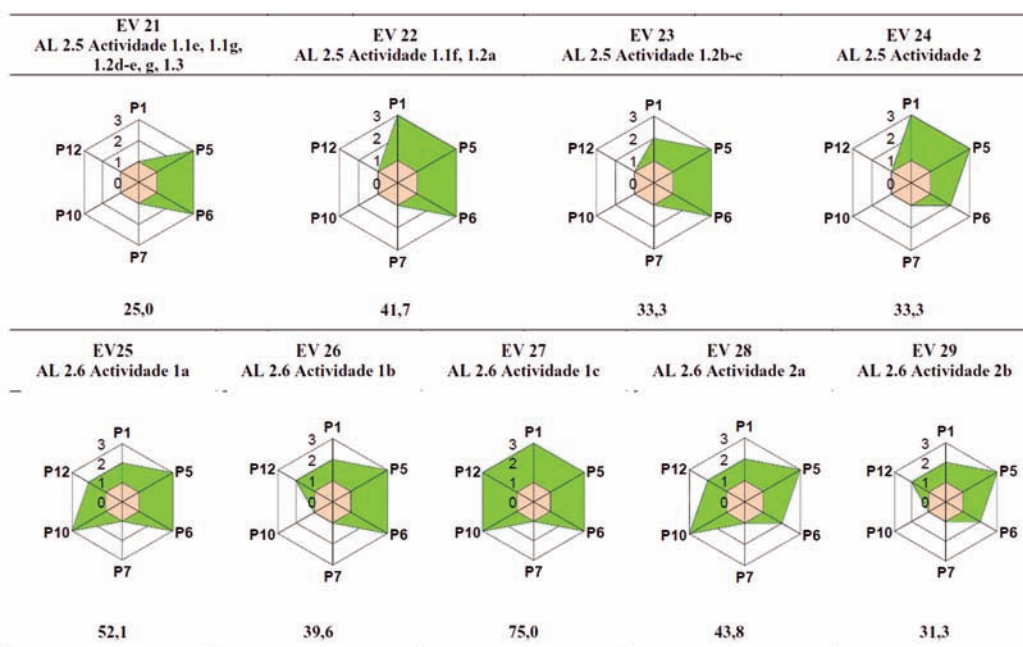


Figura 2 – Estrelas Verdes EV16-EV29 (os valores por baixo das EV são os respectivos Índices de Preenchimento da Estrela, IPE [1, 3-5])

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Uma apreciação global das EV nas Figuras 1 e 2 revela desde logo que muitas das experiências do programa do 11º ano têm severas limitações quanto à verdura, nomeadamente quanto à benignidade de realização (reagentes, condições, etc.). A discussão a seguir incide prioritariamente sobre este aspecto.

AL 1.1 Amoníaco e compostos de amónio em materiais de uso comum. As EV são iguais para todas as actividades deste grupo (EV1). A pontuação é 3 para os princípios P5 e P6 (para designação dos princípios ver [6]) por não se utilizarem substâncias auxiliares (consideraram-se as soluções como reagentes e a água respectiva não foi considerada substância auxiliar) e as experiências serem realizadas a pressão e temperatura ambientais. Todos os outros princípios têm pontuação 1. Nestas actividades não se utilizam substâncias renováveis nem degradáveis (princípios P7 e P10) e as substâncias envolvidas, ácido clorídrico concentrado (C), amoníaco gasoso (T, N), reagente de Nessler (T⁺, N) e sulfato de cobre (N), apresentam riscos elevados para a saúde e ambiente (P1) e riscos elevados de acidente (P12). Neste caso o programa não indica o sal de amónio a usar, nem as concentrações das

soluções de hidróxido de sódio e de amoníaco. Essa indicação (ver valores acima) seria aconselhável para, em situação escolar, se evitar a utilização de soluções mais concentradas do que necessário e de sais de amónio com riscos.

AL 1.2 Síntese do sulfato de tetraaminacobre(II) monoidratado.

Como se trata de uma síntese, avaliam-se dez Princípios [3] (EV2). Os princípios P5, P8 e P9 têm a pontuação 3, atendendo a que o solvente utilizado, etanol (F), não envolve riscos para a saúde (P5), não é realizada nenhuma derivatização durante o processo de síntese (P8) e não são utilizados catalisadores (P9). A pontuação dos princípios P2 e P6 reduz-se a 2 por se utilizar excesso de amoníaco (P2) e ser necessário arrefecer a mistura reaccional para cristalizar o produto (P6). Os princípios P1 e P3 têm a pontuação 1, pois o amoníaco (C, N) e o sulfato de cobre (N) envolvem riscos elevados para a saúde e ambiente. A pontuação dos princípios P7 e P10 reduz-se também a 1, pois as substâncias utilizadas não são renováveis nem degradáveis a produtos inócuos; bem como a do princípio P12, pois o amoníaco (C) e etanol (F) apresentam riscos elevados de acidente. A verdura desta síntese foi discutida pormenorizadamente em [3]. A EV mostra que seria preferível a sua substituição por

outra síntese que envolvesse substâncias mais benignas.

AL 1.3 Efeitos da temperatura e da concentração na progressão global de uma reacção.

Para este grupo, a EV da primeira actividade (EV3) só difere da EV da segunda (EV4) na pontuação do princípio P6 pois, sendo necessário aquecer a mistura reaccional, é reduzida a 2. Para os princípios P1 e P12 a pontuação é 1, pois o cloreto de cobalto (T, N) envolve riscos elevados para a saúde, ambiente e de acidente químico. O mesmo sucede para os princípios P7 e P10, porque as substâncias utilizadas não são renováveis, nem degradáveis a produtos inócuos. Seria preferível a utilização de actividades que não envolvessem compostos com riscos tão elevados.

AL 2.1 Ácido ou base: classificação de alguns materiais.

As EV para as diversas actividades deste grupo só diferem na pontuação dos princípios P6 e P12. P6 tem a pontuação 3 para todas as EV, excepto para actividade 3 (EV8), em que a pontuação é reduzida a 2, pois a experiência decorre a uma temperatura superior à temperatura ambiente. O princípio P12 tem pontuação inferior a 3 quando os indicadores ácido-base utilizados apresentam riscos de acidente químico (2 – risco moderado, 1 – risco elevado): fenolftaleína, T, actividade 1a (EV5);

tornesol, Xn e carmim de índigo, Xn, actividades 1c e 1d (EV7); indicador universal, F, e alaranjado de metilo, T, actividades 1e e 1f (EV5). Quando os indicadores não apresentam riscos de acidente (actividades 1b e 1g – azul de bromofenol e vermelho de metilo), ou quando não são usados (actividade 2), a pontuação é 3 (EV6). Os princípios P1 e P5 têm sempre a pontuação 3, uma vez que os resíduos formados são inócuos (P1) (os indicadores foram utilizados em quantidades muito reduzidas, 2 gotas, apresentando-se muito diluídos nos resíduos) e não se utilizam substâncias auxiliares (P5). Os princípios P7 e P10 têm pontuação 1 para todas as actividades, pois as substâncias utilizadas não são renováveis, nem degradáveis a produtos inócuos.

AL 2.2 Chuva “normal” e chuva ácida. Os princípios P5 e P6 têm pontuação 3 para todas as actividades deste grupo, pois as substâncias auxiliares utilizadas (soluções padrão de calibração) são inócuas (P5) e as experiências realizam-se a pressão e temperatura ambientais (P6). Por outro lado, os princípios P7 e P10 têm sempre pontuação 1, pois pelo menos uma das substâncias utilizadas não é renovável, nem degradável a produtos inócuos. Por mera comparação visual, verifica-se que a EV para a actividade 2B (EV12) apresenta uma área verde superior. A pontuação é 3 para os princípios P1 e P12 atendendo a que todos os resíduos formados são inócuos (P1) e as substâncias envolvidas apresentam um baixo risco de acidente (P12). Para a actividade 2A (EV11), a pontuação dos princípios P1 e P12 reduz-se a 2, pois os ácidos, nas concentrações em que são usados, apresentam risco moderado para a saúde e de acidente químico (Xi). Para a actividade 1a (EV9), em que ocorre produção de CO₂, o princípio P1 tem a pontuação 2, pois o cloreto de cálcio (Xi) envolve riscos moderados para a saúde, e o princípio P12 tem a pontuação 1, pois o indicador universal (F) envolve riscos elevados de acidente químico. Para a actividade 1b (EV10), que produz SO₂, a área da EV é a menor do grupo, pois os riscos para a saúde e de acidente químico são elevados, o que leva à redução da pontuação dos princípios P1

e P12 para 1 (dióxido de enxofre (T) e indicador universal (F)).

AL 2.3 Neutralização: uma reacção de ácido-base. Para todas as actividades deste grupo, os princípios P5 e P6 têm a pontuação 3, pois as substâncias auxiliares utilizadas são inócuas (soluções padrão de calibração) (P5) e as actividades são realizadas à temperatura e pressão ambientais (P6). Por outro lado, a pontuação para os princípios P7 e P10 reduz-se a 1 para todas as EV, pois as substâncias utilizadas não são renováveis (P7), nem degradáveis a produtos inócuos (P10). As EV diferem na pontuação dos princípios P1 e P12. Para as actividades 1a (EV13) e 1b (EV14), P1 tem a pontuação 3, pois os resíduos formados são inócuos (são de indicadores muito diluídos, ver atrás), mas reduz-se a 2 na actividade 2 (EV15), pois no fim da titulação existe excesso de hidróxido de sódio (Xi) no titulado (resíduo). O princípio P12 tem a pontuação 2 para as actividades 1b (EV14) e 2 (EV15), porque o hidróxido de sódio (Xi) envolve um risco moderado de acidente químico, e a pontuação é reduzida a 1 para a actividade 1a (EV13), porque se utiliza fenolftaleína (T), que apresenta um risco elevado de acidente químico. Atendendo às EV obtidas seria preferível utilizar azul de bromotimol, substância que não apresenta riscos, aliás o mais indicado, atendendo à zona de viragem.

AL 2.4 Série electroquímica: o caso dos metais. Para todas as EV deste grupo os princípios P5 e P6 têm a pontuação 3, por não se utilizarem substâncias auxiliares e as experiências serem realizadas a pressão e temperatura ambientais. Por outro lado, para todas as EV, a pontuação dos princípios P7, P10 e P12 reduz-se a 1, pois as substâncias utilizadas não são renováveis (P7), nem degradáveis a produtos inócuos (P10) e as soluções de nitratos metálicos (O) envolvem um elevado risco de acidente químico (P12). A pontuação para o princípio P1 depende da benignidade das diversas substâncias usadas, sendo: 2 para as actividades a e g-l (EV16) pois os nitrato de zinco (Xi), de alumínio (Xi) e de magnésio (Xi) envolvem um risco moderado para a saúde; e 1 para as actividades b-f (EV17), pois forma-se um precipitado de zinco finamente di-

vidido (N) que envolve um risco elevado para o ambiente (os metais que se formaram por redução foram considerados resíduos), e porque o nitrato de cobre (C) envolve um risco elevado para a saúde.

AL 2.5 Solubilidade: solutos e solventes. Nas experiências da actividade 1 avalia-se a solubilidade, classificando a solubilidade de um determinado soluto num solvente como muito solúvel, pouco solúvel ou muito pouco solúvel, para vários pares de solutos e solventes. Como não se usam substâncias auxiliares e as experiências se realizam a temperatura e pressão ambiente, a pontuação dos princípios P5 e P6 é sempre 3. Nestas condições, as EV das experiências variam conforme os riscos que os pares soluto/solvente envolvem, o que determina a pontuação dos princípios P1 e P12. Por outro lado, a pontuação dos princípios P7 e P10 resulta da renovabilidade e/ou degradabilidade dos mesmos. Para a actividade 1.1a (EV18), como as substâncias do par cloreto de sódio/água não envolvem riscos e são renováveis e degradáveis, todos os princípios têm pontuação 3. Para as actividades 1.1b e 1.1c (EV19), que envolvem os pares cloreto de cálcio (Xi, degradável)/água e carbonato de cálcio (Xi, degradável)/água, respectivamente, a pontuação do princípio P10 é 3, a pontuação dos princípios P1 e P12 é reduzida a 2 e a pontuação do princípio P7 é 1, porque pelo menos uma das substâncias dos pares soluto/solvente não é renovável. Para as restantes experiências da actividade 1, os princípios P7 e P10 são sempre pontuados 1. Para as actividades 1.1d-g, em que o solvente é água, a pontuação dos princípios P1 e P12 depende dos riscos do soluto: para o iodo (Xn, N), actividade 1.1d (EV20), a pontuação é 1 para o princípio P1 e 2 para o P12, para o heptano e hexano (Xn, F, N), actividades 1.1e-g (EV21), a pontuação é 1 para os princípios P1 e P12; finalmente, para o etanol (F), actividade 1.1f (EV22), a pontuação é de 3 para P1 e 1 para P12. Para as actividades 1.2, em que o solvente é o etanol (F), a pontuação para o princípio P12 é sempre 1, seja qual for o soluto. A pontuação do princípio P1 depende dos riscos para a saúde e ambiente do soluto: para o cloreto de sódio (sem riscos), actividade 1.2a

(EV22), é 3; para o cloreto de cálcio e carbonato de cálcio (Xi), actividades 1.2b-c (EV23), é 2; para o iodo (Xn, N), heptano e hexano (Xn, F, N), actividade 1.2d-g (EV21), a pontuação é 1. Para as actividades 1.3 (EV21) em que o solvente é o hexano (Xn, F, N), a pontuação para os princípios P1 e P12 é sempre 1, seja qual for o soluto, porque este solvente envolve riscos elevados para o ambiente e de acidente. Para a actividade 2 (EV24), em que se estuda a influência da temperatura na solubilidade do nitrato de potássio em água, a pontuação do princípio P6 é 2, porque é necessário aquecer e, atendendo a que só se utiliza água como substância auxiliar (banho maria), a pontuação do princípio P5 é 3. Como o nitrato de potássio (O) apresenta riscos elevados de acidente e não é renovável nem degradável, a pontuação para os princípios P12, P7, P10 é 1, mas 3 para P1. Seria aconselhável não utilizar o hexano, o iodo e o heptano atendendo aos riscos que apresentam para o ambiente (N).

AL 2.6 Dureza da água e problemas de lavagem.

Para as experiências

da actividade 1, como não se usam substâncias auxiliares e se realizam a pressão e temperatura ambientais, a pontuação para os princípios P5 e P6 é 3. As EV variam conforme os riscos das substâncias utilizadas para endurecer a água e dos resíduos formados, o que determina a pontuação dos princípios P1 e P12, e se são renováveis e/ou degradáveis, o que determina a pontuação dos princípios P7 e P10, respectivamente. Para a actividade 1a (EV25), como se utiliza cloreto de cálcio (Xi, degradável) como endurecedor e se forma estearato de cálcio (Xi, degradável) quando se adiciona o sabão, a pontuação é 2 para os princípios P1 e P12 e 3 para o princípio P10. Para a actividade 1b (EV26), como se utiliza sulfato de magnésio (sem indicação de riscos) e se forma estearato de magnésio (Xi, degradável) quando se adiciona o sabão, a pontuação é 2 para os princípios P1 e P12 e 1 para o princípio P10, porque pelo menos uma das substâncias não é degradável a produtos inócuos. Para ambas as actividades a pontuação é 1 para o princípio P7, porque pelo menos uma das substâncias não é renovável. Para a actividade 1c

(EV27), como se trata de água destilada, a EV depende das características do sabão utilizado. Considerou-se um sabão inócuo e biodegradável, pelo que a pontuação é 3 para todos os princípios excepto P7, para o qual é 1, por este não ser renovável. Para as experiências da actividade 2 (EV28 e 29), amacia-se as águas endurecidas nas experiências da actividade 1 com carbonato de sódio. Como é necessário aquecer, a pontuação para o princípio P6 reduz-se a 2, para os outros princípios a pontuação para as EV (EV28 e 29) é igual à das EV anteriores, (EV25 e 26), respectivamente.

DISCUSSÃO FINAL

Os resultados obtidos na análise são resumidos nos gráficos das figuras 3 e 4, mediante a distribuição da frequência das experiências em função do respectivo Índice de Preenchimento da Estrela, e no gráfico da figura 5 em função dos riscos para a saúde e ambiente, e de acidente (para realizar uma discussão global incluíram-se nestas figuras os resultados referentes ao 10º ano [1]).

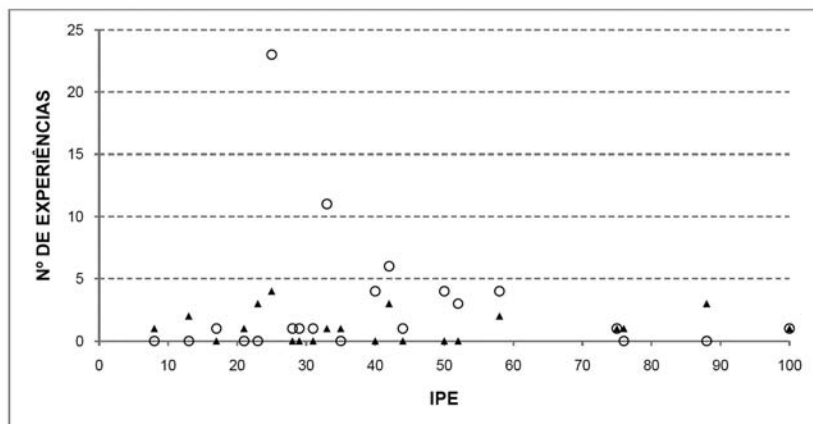


Figura 3 – Frequência das experiências em função do Índice de Preenchimento da Estrela (IPE); ▲ AL 10º Ano, ○ AL 11º Ano

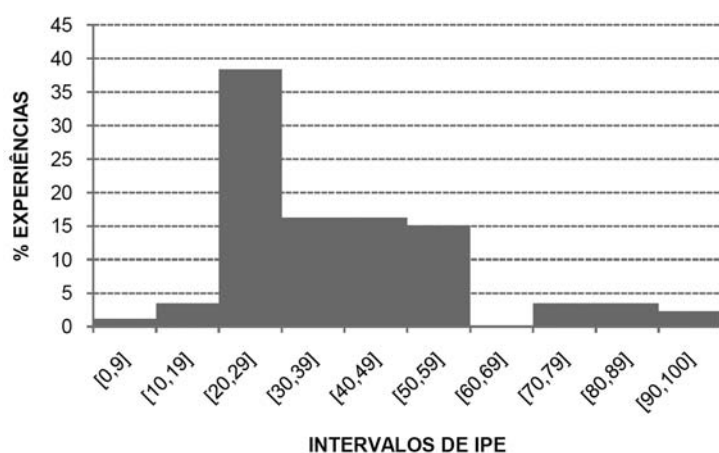


Figura 4 – Distribuição da frequência do conjunto das experiências do 10º e 11º anos em função do Índice de Preenchimento da Estrela (IPE). Número total de experiências: 86

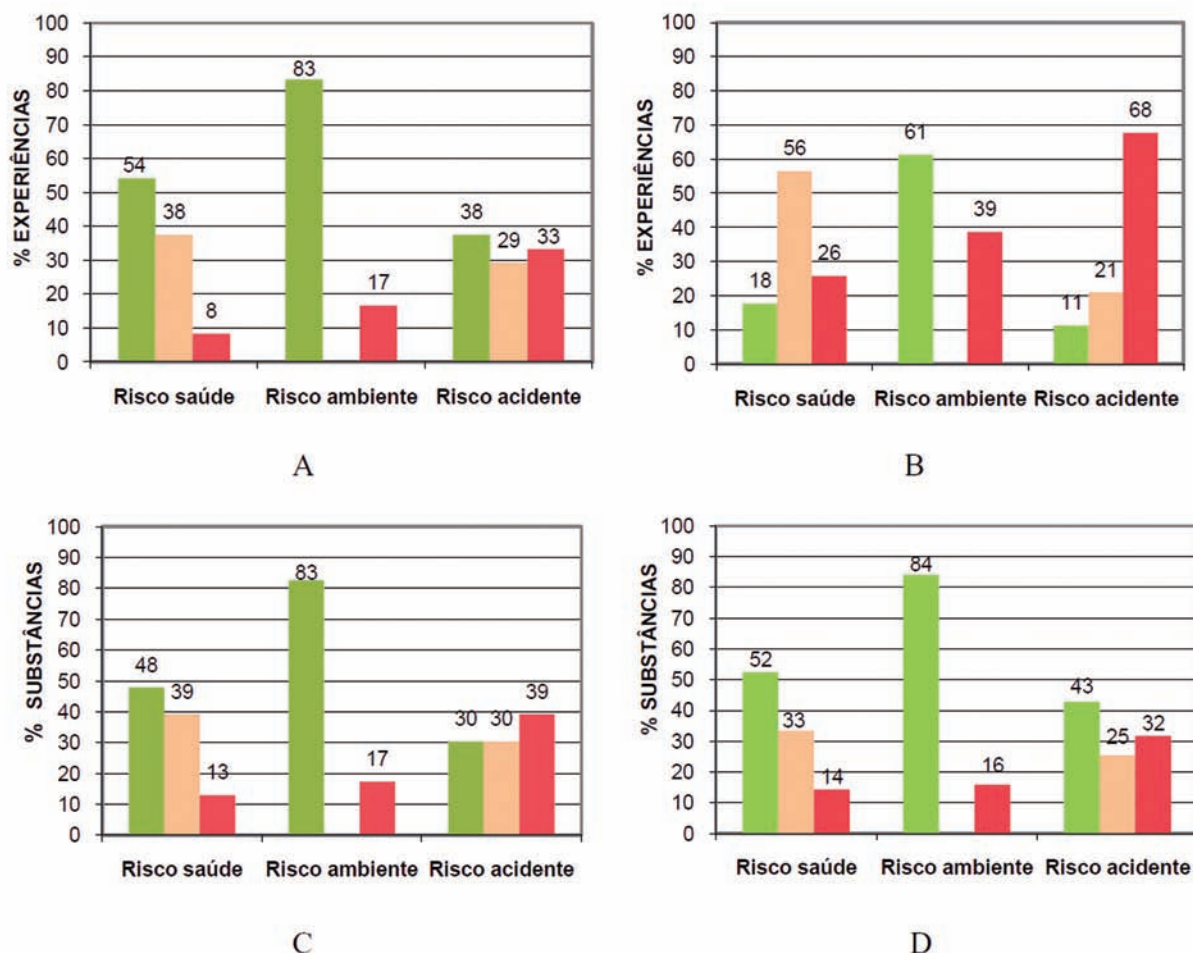


Figura 5 – Percentagem de experiências (A, B) e de substâncias (C, D) em função dos riscos para a saúde e ambiente e de acidente: (A, C) 10º ano, (B, D) 11º ano; ■ Sem Risco, ■ Risco Moderado, ■ Risco Elevado. Número de experiências: 24 do 10º ano e 62 do 11º ano. Número de substâncias utilizadas; 23 no 10º ano e 62 no 11º ano

Os resultados indicam que a maior parte das experiências em ambos os anos apresentam uma verduza limitada (IPE<50): cerca de 67% (16 em 24) das actividades laboratoriais do 10º ano e 79% (49 em 62) do 11º ano estão nessas condições. Verifica-se ainda que cerca de 75% no conjunto das actividades dos dois anos apresentam valores de IPE menores que 50 e 38% valores entre 20 e 29. Relativamente aos riscos que as experiências envolvem e considerando só experiências com riscos elevados, verifica-se que, para o 10º ano (figura 5A), 8% das experiências apresentam riscos elevados para a saúde, 17% para o ambiente e 33% de acidente, sendo os valores ainda mais elevados para o 11º ano (figura 5B), respectivamente 26%, 39% e 68%. É de referir que nas instituições de ensino público não superior não é habitual qualquer tipo de acordo com empresas de recolha de resíduos, pelo que o destino

dos mesmos acaba por ser o meio ambiente. Para esta situação contribui a utilização de substâncias com riscos elevados: no 10º ano (figura 5C), 13% das substâncias usadas apresentam riscos elevados para a saúde, 17% para o ambiente e 39% de acidente, sendo os valores semelhantes para o 11º ano (figura 5D), respectivamente 14%, 16% e 32%. As substâncias com riscos elevados para a saúde (símbolos de rotulagem T, T+, C) e para o ambiente (N) devem ser eliminadas nas actividades laboratoriais realizadas em contexto escolar.

Lateralmente, é de lamentar que no conjunto das disciplinas de Física e Química (FQ) dos 10º e 11º anos apenas seja realizada uma síntese, pois os alunos terminam o ensino secundário, quer sem praticarem mais trabalho deste tipo, quer sem sedimentarem a noção de que as reacções de síntese são o âmago da química do mundo

real, nomeadamente da química real praticada pela Indústria Química – são estas reacções que contribuem para grande parte do valor acrescentado dos produtos químicos. Os programas da disciplina de Técnicas Laboratoriais de Química [8], blocos 1 (TLQ1) e 2 (TLQ2) leccionados nos 10º e 11º anos, eliminada aquando da reestruturação curricular que deu origem aos actuais programas, previam treze sínteses. Infelizmente, não houve a preocupação de transferir para a disciplina de Física e Química esta valorização das actividades de síntese, criando-se uma situação de *colapso químico*, evidenciado pela figura 6. Esta situação mostra a falta de cuidado com que têm sido tratados os programas de química do ensino secundário quando as autoridades responsáveis decidem remexê-los (palavra adequada aos programas de química, mas possivelmente também válida para os das outras disciplinas!).

A análise conjunta das actividades laboratoriais do 10^o e 11^o anos mostra que uma parte significativa das experiências apresenta uma verdura limitada, o que releva a importância das facetas da segurança incorporadas na QV para o ensino laboratorial da química. Sem preocupação de exaustividade, na tabela 2 apresentam-se alguns aspectos a que se deve atender para introduzir a QV no ensino da Química e evitar as limitações que os programas actuais apresentam. A tabela evidencia que a maioria desses aspectos é praticamente ignorada nos programas actuais.

CONCLUSÕES

O presente estudo evidencia limitações das actividades laboratoriais realizadas nos 10 e 11^o anos do ensino secundário que podem ser naturalmente resolvidas se for adoptada a postura da QV. No entanto, a assumpção desta nos programas de ensino

da química do secundário tem interesse muito mais lato, pois potenciará múltiplas contribuições: trazer para o ensino superior alunos mais sensibilizados para as questões da Sustentabilidade e a sentirem a necessidade de aprender as chamadas “competências verdes” [12]; formar cidadãos mais conscientes da necessidade de mudanças tecnológicas e societárias para dirigir a civilização industrial para o Desenvolvimento Sustentável; bem como para a importância ambiental e societal da química, que impõe presentemente uma alteração significativa no estilo de implementação da Química Industrial, para a qual a QV é uma agente importante. Na realidade, a química está envolvida, de uma maneira ou doutra, no desenvolvimento de praticamente toda a tecnologia, pelo que a QV é fulcral para a Tecnologia Verde – essencial para se conseguir dar resposta positiva a uma das questões fundamentais do Desenvolvimento Sustentável: “Pode

uma qualidade de vida aceitável da população humana sobre a Terra ser conseguida no âmbito da civilização industrial, isto é, com base em tecnologia suportada sustentadamente nos recursos naturais do nosso planeta?”

REFERÊNCIAS

- [1] D. A. Costa, M. G. T. C. Ribeiro, A. A. S. C. Machado, Análise da Verdura das Actividades Laboratoriais do 10^o ano do Ensino Secundário, *Química - Bol. S. P. Q.* **115** (2009) 41-49.
- [2] DGIDC Web: http://sitio.dgicd.min-edu.pt/secundario/paginas/programas_es_f.aspx (Direcção Geral de Inovação e Desenvolvimento Curricular, acessado em 17-01-2011).
- [3] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa, A. A. S. C. Machado, Uma Métrica Gráfica para Avaliação Holística da Verdura de Reacções Laboratoriais – “Estrela Verde”, *Química Nova* **33** (2010) 759-764.
- [4] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa, A. A. S. C. Machado, “Green Star”: a Holistic Green Chemistry Metric for Evaluation of Teaching Laboratory Experiments, *Green Chem. Lett. and Rev.* **3** (2010) 149-159.
- [5] M. G. T. C. Ribeiro, A. A. S. C. Machado, Metal Acetylacetonates’ Synthesis Experiments – Which is Greener?, *J. Chem. Ed.*, aceite para publicação.
- [6] A. A. S. C. Machado, Química e Desenvolvimento Sustentável, *Química - Bol. S. P. Q.* **95** (2004) 59-67.
- [7] http://www.merck-chemicals.com.pt/sid=LRNTVzIKIG1SV389pJVBAJrK_hDWSPoe6jxtcJ3LCCO-piWLS-qubxsNDOdKE0vvYtttcJ3L_hDWSEJqAxtcJ3L?CountryName=Portugal.
- [8] *Programas de Técnicas Laboratoriais de Química Blocos I e II*, Ministério da Educação, Gabinete de Educação Tecnológica, Artística e Profissional, Porto, 1992.
- [9] A. A. S. C. Machado, Métricas da Química Verde – A Produtividade Atómica, *Química - Bol. S. P. Q.* **107** (2007) 47-55.
- [10] R. A. Frosch (ed.), *Industrial Environmental Performance Metrics – Challenges and Opportunities*, National Academy Press, Washington, 1999.
- [11] D. T. Allen e D. R. Shonnard, *Green Engineering – Environmentally Conscious Design of Chemical Processes*, Prentice-Hall, Upper Saddle River, 2002.
- [12] European Centre for the Development of Vocational Training (CEDEFOP), *Skills for Green Jobs*, European Synthesis Report, UE, 2010.

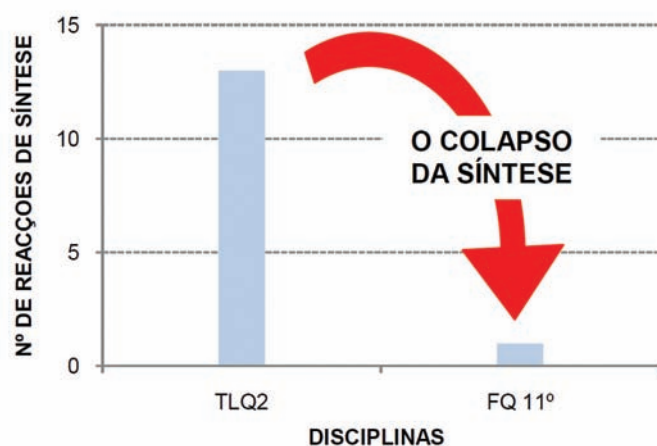


Figura 6 – O colapso da síntese no ensino secundário: distribuição das reacções de síntese por disciplina (os programas das disciplinas TLQ1 e FQ10 não envolviam sínteses; as TLQ foram banidas)

Tabela 2 – Incorporação da QV no ensino da Química

Aspectos a considerar para o ensino da QV	Limitações dos programas actuais
Princípios da QV [6]	Omissos nos programas em vigor
Análise da verdura, em sentido amplo, das actividades laboratoriais [1, 3-5]	Os programas limitam-se a referir, em alguns casos, o manuseamento seguro dos reagentes (os resíduos produzidos são ignorados)
Cálculo de métricas de produtividade química (métricas de massa) [9] e ambientais [10, 11]	Calcula-se simplesmente o rendimento
Química real da Indústria Química, incluindo sínteses onde as técnicas laboratoriais podem ser incluídas	As referências à Indústria Química são inconsistentes e não envolvem a perspectiva da Sustentabilidade
Papel fulcral dos químicos na resolução dos problemas da degradação do ambiente	Omissos nos programas em vigor
Realização de trabalho laboratorial, incluindo sínteses, à microescala	A microescala é proposta em alguns casos, limitando-se porém à química de gotas

WEBQUEST: “INVESTIGANDO A CHUVA ÁCIDA”

M. ROSÁRIO BELEZA¹, JOÃO PAIVA^{2,*}, CARLA MORAIS²

É reconhecida a necessidade da educação ser mais eficaz na compreensão e na percepção individual e colectiva, com vista a melhores exercícios de cidadania, dos problemas que se colocam nas sociedades contemporâneas, sobretudo aqueles em que os aspectos científico-tecnológicos são mais evidentes. Sendo assim, as comunidades científicas e educativas detêm uma importante responsabilidade nos processos que intervêm na formação gradual e global do indivíduo enquanto cidadão. Torna-se importante desenvolver propostas de ensino que contemplem inter-relações Ciência – Tecnologia – Sociedade – Ambiente (CTSA), que incluam perspectivas de investigação nos percursos educativos, e que exijam a participação e envolvimento dos professores e dos alunos, promovendo a sintonia entre problemas e recursos actualizados [1]. A metodologia WebQuest enquadra-se claramente neste tipo de propostas, pois para além de visar a aquisição de conhecimentos específicos no domínio de um dado tema, permite criar um ambiente de trabalho ideal para a concretização dos objectivos visados por este tipo de ensino. Partilha-se ainda a ideia, apoiada pela prática pedagógica, de que a WebQuest constitui não só uma interessante metodologia de trabalho para os alunos, como pode assumir também uma excelente oportunidade de desenvolvimento profissional para os professores.

A WebQuest, como actividade de pesquisa orientada, é um modelo concebido para utilizar o potencial educativo da Internet, propondo-se como uma alternativa didáctica onde, num contexto de resolução de problemas reais e que envolvam a mobilização do pensamento crítico, se tentam desenvolver competências e atingir níveis de aprendizagem mais elevados, em ambiente de aprendizagem colaborativa [2]. A clara explicitação dos objectivos e a selecção prévia dos sítios a serem consultados pelos alunos ao longo do processo, evitam a dispersão e a perda de tempo, características das pesquisas livres na *Web*.

Em geral, uma *WebQuest* é elaborada pelo professor para ser realizada pelos alunos, reunidos em grupos. Desenvolve-se, assim, uma situação pedagógica que promove a utilização das tecnologias de informação em sala de aula, o que permite tirar partido das suas potencialidades a favor

de uma aprendizagem mais motivante e consolidada, favorece o trabalho de equipa e é portadora de vantagens: para os alunos, porque os ajuda a lidar com as dificuldades inerentes à enorme quantidade de informação disponível na *Internet*, modelando as suas estratégias de pesquisa, selecção e avaliação e fornecendo-lhes o ambiente adequado para o desenvolvimento de competências essenciais a uma melhor integração na sociedade em que vivemos; para os professores, porque os coloca perante desafios concretos, resultantes da necessidade de exploração do potencial pedagógico da *Internet*, permitindo-lhes o uso de novos recursos e o experimentar de novas formas de trabalho, facultando-lhes a oportunidade para o questionamento e a reestruturação das suas concepções e práticas educativas actuais, oferecendo ainda óptimas possibilidades para o desenvolvimento de actividades cooperativas interdisciplinares [3]. Contribui-se, assim, para a prática do professor, promovendo no aluno o sentido crítico e a interacção, garantindo informações autênticas e actualizadas, inovando

o trabalho tradicional de sala de aula, propondo tarefas práticas e genuínas, capazes de desenvolver actividades cognitivas, criativas e cooperativas. Favorece-se ainda o trabalho de autoria dos professores e o compartilhar de saberes pedagógicos concebidos, como publicações típicas do espaço *Web* (abertas, de acesso livre, gratuitas). Em síntese, é necessário desenvolver investigação para conceber, implementar, testar e avaliar novas estratégias de ensino, o que pressupõe e requer participação e envolvimento activo e cooperativo de professores nesses empreendimentos. No que se refere à metodologia *WebQuest*, isso envolve, naturalmente, a existência de mecanismos de validação destes instrumentos para que seja possível explorar todo o seu potencial.

EXPLORAÇÃO DO TEMA “CHUVA ÁCIDA” USANDO UMA WEBQUEST

Contextualização

No âmbito do Mestrado em Física e Química em Contexto Escolar da Faculdade de Ciências da Universidade

^{1,2} Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.
¹ Agrupamento de Escolas da Senhora da Hora
^{*} jcpaiva@jcpaiva.net

do Porto (FCUP), desenvolveu-se uma *WebQuest* sobre o tema “Chuvas Ácidas”, com integração curricular na disciplina de Física e Química A do 11º ano de escolaridade; pretendia-se verificar se esta *WebQuest* poderia ser inserida, com vantagem, no ensino-aprendizagem da temática a ela subjacente, visando não só a aquisição e consolidação de conhecimentos em ambiente de aprendizagem motivador, capaz de fomentar a aprendizagem colaborativa, mas a criação de uma situação de educação formal capaz de integrar inter-relações CTSA.

Duração: A *WebQuest* foi concebida para ser desenvolvida durante três aulas (uma semana) ou seja, trata-se de uma *WebQuest* de curta duração.

DESCRIÇÃO DO RECURSO UTILIZADO

Introdução

A página inicial de “Investigando as Chuvas Ácidas” contém um menu principal (*frame*), que se mantém presente de forma a que se possa aceder a qualquer etapa da *WebQuest*, em qualquer momento da navegação.

Nesta página introduz-se o tema da chuva ácida e faz-se o seu enquadramento, sendo focados os seguintes aspectos:

- Na origem das *chuvas ácidas* está a presença na atmosfera de gases poluentes, na sua maioria emitidos pelos países industrializados; as nuvens que transportam esses gases deslocam-se para áreas por vezes não poluídas e até distantes dos locais de emissão.
- A consciência destes problemas tem levado entidades governamentais e até organismos supranacionais à adopção de medidas de controlo da poluição, desde a imposição de regras à actividade

industrial até aos pequenos gestos do quotidiano.

- Muitas pessoas têm dificuldade em discutir estes temas, dado que exigem conhecimentos de Química. Desta forma, à volta de assuntos tão importantes para todos nós, instalam-se dúvidas, circulam “ideias feitas” e regista-se alguma falta de opinião crítica.

Tarefa

A partir da leitura de dois textos, adaptados de notícias publicadas em jornais sobre a Central Termoeléctrica de Sines, apontam-se algumas pistas concretas que serão depois objecto de pesquisa no contexto do cenário seguinte:

Uma grande unidade industrial pretende instalar uma central de produção de energia na zona onde vivem os alunos; é atribuída a um grupo de trabalho, constituído por três especialistas, a responsabilidade de esclarecer uma série de pontos, de forma a promover uma opinião mais informada, junto da comunidade, sobre a referida instalação.

Para cumprir a tarefa, cada um dos grupos de alunos deverá:

- ✓ Ler os textos adaptados de artigos publicados em conhecidos jornais sobre a central de Sines.
- ✓ Identificar o que é a chuva ácida e quais as suas principais causas; determinar os efeitos da chuva em sistemas bióticos e abióticos; identificar os métodos eficazes na sua redução.
- ✓ Organizar, em trabalho de grupo, um conjunto de informações que permitam aos membros da comissão municipal o esclarecimento das suas dúvidas sobre este assunto.

Cada especialista participa na apresentação de grupo e será responsável por:

- Um **cartaz** contendo a informação mais importante relativamente à sua área. O objectivo é informar a comunidade, portanto, o cartaz *deverá responder claramente às questões propostas*, devendo ser procuradas nos *sites* seleccionados (**Recursos**) as imagens adequadas a esse fim.
- Um **resumo** escrito contendo os dados e as conclusões e que servirá de base de trabalho e de suporte à argumentação de cada cartaz, devendo incluir a posição do grupo relativamente à instalação daquele equipamento.

A apresentação será feita em conjunto, pelo grupo, criando-se assim um espaço para reflectir e avaliar formativamente as respectivas aprendizagens.

Os trabalhos desenvolvidos serão expostos ou publicados na plataforma Moodle da Escola.

Processo

Os alunos irão trabalhar em grupos de três, escolhendo cada aluno um dos papéis neste cenário – **ecologista, químico e engenheiro ambiental**. Cada especialista é associado a uma imagem que inclui sempre o planeta, por questões de coerência. Em seguida, iniciam a pesquisa e, acedendo aos endereços presentes em *Recursos*, tentarão responder às questões / esclarecer os itens, sugeridos em cada caso (Figura 2).

No final, cada grupo fará a apresentação à turma do conteúdo dos seus cartazes e fará a defesa da posição tomada pelo grupo, havendo lugar para uma discussão de ideias moderada pelo professor.

Recursos

Nesta secção são referidos os *sites* que disponibilizam a informação. Estes foram seleccionados pelos seus conteúdos (actualizados, pertinentes, ...), apresentando-se ordenados alfabeticamente e não discriminados pelos diferentes tópicos de pesquisa as-

Introdução Tarefa Processo Recursos Avaliação Conclusão Destinatários



Figura 1 – Printscreen da Página inicial da *WebQuest* “Investigando as Chuvas Ácidas”

sociados a cada um dos especialistas. Foram incluídos vários sites institucionais e ainda *recursos adicionais*.




Especialista	Questões a serem respondidas /desenvolvidas
 <p>Químico</p>	<ol style="list-style-type: none"> O que é a chuva ácida? Que substâncias são responsáveis pela chuva ácida? Como se forma a chuva ácida? Qual é a acidez normal da chuva? Quais os efeitos da chuva ácida em sistemas abióticos (materiais / património arquitectónico).
 <p>Ecologista</p>	<ol style="list-style-type: none"> Quando foi identificada a chuva ácida? Quais os efeitos da chuva ácida em sistemas bióticos: <ol style="list-style-type: none"> em ecossistemas terrestres e aquáticos; na agricultura; nos seres humanos.
 <p>Engenheiro Ambiental</p>	<ol style="list-style-type: none"> Quais as causas naturais e antropogénicas da chuva ácida? Relacionar as chuvas ácidas com a industrialização e alguns hábitos de consumo das sociedades tecnológicas. Que medidas podem ser tomadas para reduzir a chuva ácida e para corrigir os seus efeitos?

Figura 2 – Printscreens da etapa “Processo”

Avaliação

A avaliação da actividade será feita tendo em conta dois itens: o grau de participação de cada aluno no trabalho do grupo e as respectivas apre-

sentações, de acordo com critérios, presentes numa tabela, onde estão definidos níveis de desempenho para cada um dos itens a avaliar.

Conclusão

Nesta secção, que antecede a concretização, insiste-se na motivação, lembrando que a protecção do ambiente é responsabilidade de todos e é vital para o nosso bem-estar, lembrando ainda como a química das gotas da chuva pode ter um importante efeito sobre o nosso ambiente e a nossa comunidade. Referem-se também os objectivos que é desejável terem sido atingidos pelos alunos com a realização desta actividade:

- ✓ **Aprofundar conhecimentos** sobre o processo de formação da chuva ácida e as suas principais causas.

- ✓ **Compreender os impactes** da chuva ácida no ambiente.
- ✓ Tornarem-se mais capazes de **alterar comportamentos**, a nível pessoal, que contribuam para minimizar as chuvas ácidas.

Apontam-se ainda algumas sugestões para pesquisas adicionais sobre temas relacionados, tais como, a forma como é gerada a energia eléctrica consumida em Portugal, fontes de energia que utilizam os diferentes países da UE, comparação entre os diferentes tipos de combustíveis quanto aos poluentes produzidos; estas pesquisas que podem ser realizadas a partir dos endereços presentes em **Referências adicionais** na secção Recursos.

A *WebQuest* “Investigando as Chuvas Ácidas” está disponível *on-line* em: http://nautilus.fis.uc.pt/cec/webquests/WQ_Chuvas_Acidas/index.htm.



ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

REACÇÕES MEDIADAS POR UM ÁTOMO

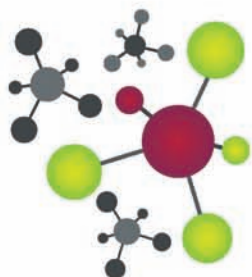
De acordo com um estudo realizado no âmbito de uma colaboração entre equipas de investigação da China e do Estados Unidos da América, é possível sintetizar catalisadores baseados em átomos isolados de metais preciosos suportados numa superfície de óxidos metálicos (Nat. Chem., DOI: 10.1038/nchem.1095). Este trabalho pode conduzir ao desenvolvimento de catalisadores industriais de baixo custo e aborda questões importantes no contexto da ciência catalítica. Catalisadores constituídos por partículas de platina, ou outros metais suportados em óxidos, são vastamente utilizados no tratamento de gases de escape de motores de combustão e numa grande variedade de aplicações industriais. Como apenas os átomos metálicos na superfície das partículas assumem o processo de catálise, é expectável que o objectivo dos fabricantes consista numa progressiva diminuição do tamanho das partículas de modo a maximizar a utilização do material. No entanto, o desafio de produzir distribuições uniformes de partículas subnanomé-

tricas permanece uma questão em aberto. Por outro lado, a tendência para a aglomeração das partículas muito pequenas, com a consequente desactivação catalítica, induz problemas adicionais neste tipo de abordagem. Através da optimização da temperatura, pH e outros parâmetros, num processo de co-precipitação, a equipa mista sino-americana desenvolveu um processo de síntese que ultrapassa estes problemas. Botao Qiao e Tao Zhang do Dalian Institute of Chemical Physics, na China, Jun Li da Tsinghua University, em Pequim, China, Jingyue Liu da University of Missouri, em St. Louis, e colaboradores, usaram microscopia de resolução atómica e outros métodos analíticos para determinar que o seu processo possibilita a síntese de nanocristalites de óxido de ferro com átomos de platina isolados dispersos sobre a sua superfície. O grupo comparou o catalisador de átomo único com outros catalisadores de platina e usou como referência um catalisador de ouro de alto desempenho para reacções de oxidação de CO. Uma

bateria de testes avaliou a capacidade dos catalisadores mediarem a oxidação de CO num meio rico em hidrogénio. O objectivo consiste em purificar o hidrogénio através da eliminação de baixos conteúdos de CO (um contaminante comum que afecta catalisadores de células de combustível). Em todos os casos, os investigadores concluíram que o novo catalisador de átomo único permanece estável sob condições reacionais típicas e apresenta actividades de pelo menos duas ou três vezes os valores verificados para os outros catalisadores.

(adaptado do artigo de 01/08/2011 de Mitch Jacoby: Single Atoms Mediate Reaction
Chemical & Engineering News – <http://pubs.acs.org/cen/news/89/i31/8931notw6.html>)

Paulo Brito
(paulo@ipb.pt)
Instituto Politécnico de Bragança



XXIV IUPAC

PHOTOCHEMISTRY CONFERENCE

15 - 20 JULY 2012 | COIMBRA

Dear Colleagues and Friends,

On behalf of the IUPAC Symposium Scientific Organizing Committee (SOC). I am very pleased to be able to invite you to attend the XXIVth IUPAC Symposium on Photochemistry, which will be held in Coimbra, from 15-20 July 2012.

Hugh D. Burrows (Portugal)
Chairman International Scientific Committee

SYMPOSIUM KEY DATES

Registration Online Opens	1 December 2011
Early Bird Registration Deadline	6 May 2012

Abstract Submission Online Opens	1 December 2011
Abstract Submission Deadline	16 April 2012
Abstract Acceptance Notification	30 April 2012
Registration Online Closes	10 July 2012
Symposium Opening	15 July 2012

PROGRAMME TOPICS

- Organic and inorganic photochemistry from a synthetic and mechanistic point of view
- Solar energy conversion
- Photocatalysis, environmental and green photochemistry
- Materials science and engineering
- Supramolecular chemistry
- Photoactive nanoparticles and nanomaterials
- Photobiology, biophysics and skin photochemistry
- Photochemistry in medicine
- Luminescent probes, sensors and imaging
- Spectroscopy and instrumentation
- Photochromism and photoswitching
- Industrial applications of photochemistry and photophysics
- Photochemistry and cultural heritage



For General Information/ Symposium Secretariat: photoiupac2012secretariat@leading.pt

www.photoiupac2012.com

Química para os mais novos

Marta C. Corvo

Departamento de Química
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade Nova de Lisboa
marta.corvo@dq.fct.unl.pt



Introdução

As actividades propostas têm ambas alimentos como pretexto. Na primeira prepara-se um chupa-chupa, enquanto se admira um processo de cristalização. O conceito mais difícil de transmitir será a paciência necessária para que os cristais se formem. Em todas as experiências a advertência de não ingerir nada é uma constante, no entanto esta actividade poderá ser uma excepção. Na segunda actividade procura-se um dos nutrientes mais comuns nos alimentos - o amido. Através de uma transformação química identifica-se a presença deste composto.

1- Soluções sobressaturadas – Doces cristais

Atenção: O aquecimento da mistura de água com açúcar deverá ser feito por um adulto.

Material:

- Água
- Açúcar
- Copo medida
- Colher de pau
- Corante alimentar (opcional)
- Recipiente para aquecer
- Pau de chupa-chupa ou um fio e um lápis
- Frasco alto
- Mola



Procedimento:

1. Num recipiente que possa ir ao lume, misturar uma chávena de água com duas de açúcar. Aquecer, mexendo com a colher de pau, até que entre em ebulição. Quando todo o açúcar se dissolver a solução fica translúcida. Deixar em ebulição cerca de 5 minutos. Após este tempo retirar do lume.
2. Adicionar $\frac{1}{4}$ de colher de chá de corante alimentar (opcional).
3. Esperar até que a solução resultante arrefeça.

4. Transferir a solução para um frasco alto.
5. Colocar o pau de chupa-chupa dentro da solução, retirar e deixar secar. Depois de seco (pode ser só no dia seguinte), observam-se cristais. Voltar a mergulhar dentro do frasco sem tocar no fundo (deixar a cerca de 2 cm), e prender com uma mola. Em alternativa pode fazer-se este passo com um fio e um lápis, para tal mergulha-se o fio na solução, retira-se e deixa-se secar. Depois ata-se a outra ponta ao lápis, e mergulha-se na solução de modo a que não toque no fundo.



6. Não mexer na solução para permitir a formação de cristais, o que deve demorar alguns dias. Dentro de 2 a 3 semanas deverá estar pronto (!). (Atenção se não se observarem nenhuns cristais ao fim de algumas horas, retirar a solução do frasco, aquecer novamente e adicionar pequenas quantidades de açúcar, mexendo sempre. Quando o açúcar ficar por dissolver, parar a adição, e repetir o resto do protocolo a partir do passo 3).



Explicação:

Uma solução é uma mistura homogénea de duas ou mais substâncias. A solução é composta pela substância que se dissolve – o soluto, e a substância que provoca a dissolução – o solvente. Há um limite para a quantidade de soluto que conseguimos dissolver numa determinada quantidade de solvente a uma dada temperatura. Esta quantidade é característica de cada substância e chama-se solubilidade. Quando já não conseguimos dissolver mais soluto, diz-se que a solução está saturada. Foi isso que fizemos quando adicionámos o açúcar (soluto) à água (solvente) e aquecemos. Depois, com o passar do tempo, a água começou a evaporar e a solução tornou-se mais saturada, ficou

sobressaturada. As soluções sobressaturadas são instáveis, e qualquer perturbação faz com que as moléculas do soluto se aproximem, se juntem formando cristais visíveis. Diz-se que o soluto precipita quando os cristais aparecem na solução. Os primeiros cristais que precipitam são muito pequenos para serem observados mas, à medida que mais moléculas precipitam, os cristais aglomeram-se formando cristais cada vez maiores.

II- Onde está o amido?

Atenção: A tintura de iodo deverá ser mantida afastada das crianças mais pequenas. É nociva e destina-se somente a uso externo.

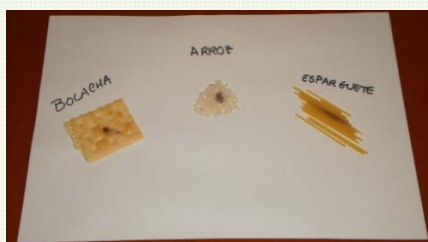
Material:

- Bolachas
- Arroz
- Esparguete
- Folha de papel
- Papel vegetal
- Água
- 5 Copos de plástico
- 4 Palhinhas
- Colher de sopa
- Colher de chá
- Conta-gotas
- Marcador

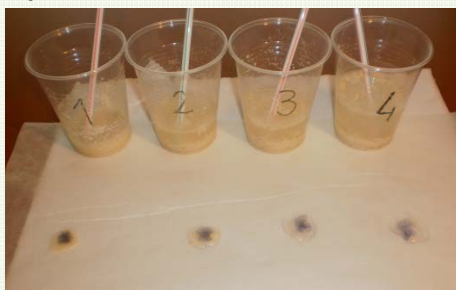


Procedimento:

1. Num copo adicionar 1/8 de colher de chá de tintura de iodo a duas colheres de chá de água. Identificar este copo com a **solução de tintura de iodo**.
2. Na folha de papel marcar três áreas: Bolacha; Arroz; Esparguete. Colocar uma pequena quantidade de cada um destes alimentos na respectiva área.
3. Com o conta-gotas adicionar uma gota da **solução de tintura de iodo** a cada um destes alimentos. O que se observa? A mudança de cor da solução de tintura de iodo indica a presença de amido. Será que todos estes alimentos contém a mesma quantidade de amido?



4. Identificar os copos com os números **1**, **2**, **3** e **4**. Colocar em cada um deles a mesma quantidade de bolacha. Esmagar a bolacha e adicionar duas colheres de sopa de água ao copo **1**, quatro colheres de sopa de água ao copo **2**, seis colheres de sopa de água ao copo **3** e oito colheres de sopa de água ao copo **4**.
5. Usar as palhinhas para misturar a bolacha com a água. Usar uma palhinha para cada copo.
6. Retirar 3 gotas de cada copo e colocar sobre o papel vegetal.
7. Adicionar uma gota da **solução de tintura de iodo** às gotas retirada de cada um dos copos. A cor muda em todas as soluções? Da mesma maneira?



Explicação:

Quando adicionamos a solução de tintura de iodo aos alimentos ocorreu uma reação química. O iodo reagiu com as moléculas de amido formando outra substância, um complexo de cor azul escura (ou preta). Esta mudança de cor indica-nos a presença de amido. Será que todos estes alimentos contém a mesma quantidade de amido? A quantidade de amido presente é proporcional à intensidade da cor resultante. Ao testarmos os copos com as misturas com diferentes quantidades de água, dever-se-á obter a maior mudança de cor na mistura com menor quantidade de água e a menor variação na mistura com maior quantidade de água. No copo 1 o amido está mais concentrado, enquanto que no copo 4 está mais diluído.

Bibliografia

- [1] J. VanCleave, *Janice VanCleave's A+ Projects in Chemistry: winning experiments for science fairs and extra credit*. John Wiley & Sons, Inc., 1993, p. 67-72.
- [2] http://208.77.250.174/portal/PublicWebSite/education/whatischemistry/scienceforkids/characteristicsofmaterials/food/CSTA_014936, acessado em 25/10/2011.



3RD PORTUGUESE YOUNG CHEMISTRY MEETING – 3PYCHEM
9 - 11 MAIO 2012 NO PORTO

O *Portuguese Young Chemists Meeting* está de volta!

No Ano Internacional da Química, o encontro de jovens químicos portugueses irá decorrer entre 9 a 11 de Maio de 2012, no Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. O 3PYChemM conta com o apoio do Grupo de Jovens Químicos (GJQ) e da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ).

Com o patrocínio da Hovione, serão atribuídas **bolsas de mérito** que cobrirão o valor da inscrição. O concurso para candidatura estará, brevemente, disponível em <http://www.spq.pt/gqj/3pychem/>.

Se és recém-doutorado, não percas a oportunidade de concorrer à segunda edição do *Portuguese Young Chemists Award*, que será entregue no 3PYChemM. Para mais informações, consultar o endereço Web do encontro.

E: 3pychem@spq.pt

URL: <http://www.spq.pt/gqj/>



11^º ENCONTRO DE QUÍMICA DOS ALIMENTOS (11EQA)
16 - 19 SETEMBRO 2012 EM BRAGANÇA

Sob os auspícios da Divisão de Química Alimentar da Sociedade Portuguesa de Química, e na sequência dos encontros que tiveram lugar em Santarém, Aveiro, Faro, Coimbra, Porto, Lisboa, Viseu, Beja e Angra do Heroísmo, decorrerá entre 16 e 19 de Setembro de 2012, no Instituto Politécnico de Bragança, o 11^º Encontro de Química dos Alimentos.

Os Encontros de Química dos Alimentos, cuja 1^a edição ocorreu em 1993, constituem já uma referência no domínio da Química e da Ciência dos Alimentos em Portugal. A 11^a edição deste destacado evento, será certamente uma plataforma de discussão sobre os avanços mais recentes na área da Química Alimentar, primando, uma vez mais, pela qualidade dos trabalhos apresentados.

Toda a informação relativa a este encontro estará brevemente disponível a partir da página Web da SPQ.

E: equa11@ipb.pt



INTERNATIONAL WORKSHOP ON IONIC LIQUIDS – SEEDS FOR NEW ENGINEERING APPLICATIONS

2 - 3 FEVEREIRO 2012 EM LISBOA

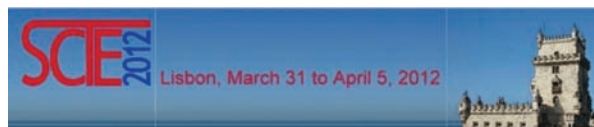
Por ocasião da Comemoração do Centenário da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL), irá decorrer, nos dias 2 e 3 de Fevereiro de 2012, em Lisboa, o Workshop Internacional sobre Líquidos Iónicos, organizado pelo Departamento de Química e Bioquímica da FCUL em colaboração com a Universitat Rovira I Virgili (URV), Tarragona, Espanha.

Este workshop pretende reunir investigadores que desenvolvem trabalho na área dos líquidos iónicos, nanomateriais e fluidos para transferência de calor, com o objectivo de discutir possíveis aplicações no campo da transferência de calor e a viabilidade económica e desafios técnicos associados. As indústrias relacionadas com este tema são desde logo convidadas a participar no workshop, com o intuito de promover a partilha de conhecimentos e ideias, bem como a criação de novas colaborações. O workshop incluirá sessões plenárias proferidas por peritos internacionalmente reconhecidos, quer da academia, quer da indústria, bem como apresentações de trabalhos no formato de comunicação oral e de poster.

Mais detalhes podem ser consultados na página Web do evento.

E: wils2012@fc.ul.pt

URL: <http://www.dqb.fc.ul.pt/wils2012/>



18TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOLID COMPOUNDS OF TRANSITION ELEMENTS (SCE)

31 MARÇO - 5 ABRIL 2012 EM LISBOA

Após o sucesso da mais recente conferência SCE realizada em Annecy, França, em 2010, a 18^a edição deste evento terá lugar na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, entre os dias 31 de Março e 5 de Abril de 2012. Este evento pretende ser uma oportunidade única para troca de ideias e conhecimentos sobre os mais recentes avanços na área, incluindo sessões plenárias proferidas por especialistas de renome internacional. Esta conferência incluirá igualmente comunicações no âmbito de projectos em curso, quer por parte de jovens investigadores, quer por alunos de doutoramento, tendo por objectivo a apresentação dos progressos mais recentes, bem como estimular novas parcerias e projectos de colaboração entre equipas de investigação.

Este fórum permitirá certamente uma discussão aberta e informal sobre a investigação fundamental e aplicada na área da química do estado sólido, física e ciência dos materiais de compostos contendo elementos de transição. Os principais tópicos da conferência incluem: processos e síntese; equilíbrio de fases; termodinâmica; propriedades magnéticas e eléctricas; teoria, estrutura electrónica e ligação química; aplicações. Para mais informações, aconselha-se a consulta da webpage da conferência.

E: SCTE2012@itn.pt
URL: <http://scte2012.itn.pt/>



4TH EUChEMS CHEMISTRY CONGRESS
26 - 30 AGOSTO 2012 EM PRAGA, REPÚBLICA CHECA

O 4º Congresso Europeu de Química irá realizar-se em Praga, na República Checa, entre os dias 26 e 30 de Agosto de 2012, sendo organizado pela European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS), a qual congrega cerca de 50 sociedades, incluindo a Sociedade Portuguesa de Química, representando um total de 150000 químicos. À semelhança do sucesso das edições anteriores deste congresso (Budapeste 2006, Torino 2008 e Nuremberga 2010), a 4ª edição proporcionará a oportunidade de apresentar as mais recentes investigações em todas as áreas da química, reunindo cientistas da indústria, academia e instituições governamentais, gerando uma plataforma para a discussão das contribuições da química para a inovação na Europa e no mundo, procurando responder aos grandes desafios globais. Mais informações poderão ser obtidas na página Web do evento.

E: info@euchems-prague2012.cz
URL: <http://www.euchems-prague2012.cz/>



EUCHEM CONFERENCE MOLTEN SALTS AND IONIC LIQUIDS
5 - 11 AGOSTO 2012 EM CELTIC MANOR, PAÍS DE GALES

Sob os auspícios da European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS) e da Royal Society of Chemistry, decorrerá em Celtic Manor, entre os dias 5 e 11 de Agosto de 2012, a 4ª Conferência em Sais Fundidos e Líquidos Iónicos. Apesar de esta ser considerada apenas a 4ª edição destas conferências, a sua história data desde 1966, altura em que a 1ª EUCHEM Conference on Molten Salts teve lugar na Noruega, continuando até 2006, ano em que as comunidades de investigadores de líquidos iónicos e sais fundidos se juntam para realizar a 1ª conferên-

cia conjunta. À semelhança dos três encontros anteriores (Tunísia 2006, Dinamarca 2008 e Alemanha 2010), esta conferência servirá uma vez mais como plataforma e oportunidade única e privilegiada de troca de ideias, experiências e conhecimentos entre cientistas de ambas as áreas. Toda a informação relativa a este encontro encontra-se disponível na respectiva página Web.

E: euchem2012@qub.ac.uk
URL: <http://www.euchem2012.org/>



20TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON POLYMER CHARACTERIZATION -
WORLD FORUM ON ADVANCE MATERIALS
26 - 30 MARÇO 2012 EM DUBROVNIK, CROÁCIA

Sob os auspícios da International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), realiza-se, nos dias 26 a 30 de Março de 2012, na Croácia, a vigésima Conferência Internacional em Caracterização de Polímeros (POLYCHAR). Esta série de prestigiadas conferências anuais teve inicialmente lugar nos Estados Unidos da América, país em que decorreram as onze conferências iniciais, às quais se seguiram as realizadas em Portugal (2004), Singapura (2005), Japão (2006), Brasil (2007), Índia (2008), França (2009), Alemanha (2010) e Nepal (2011).

O Fórum Mundial POLYCHAR sobre Materiais Avançados fornece uma plataforma para a apresentação de inovações em Ciência e Engenharia dos Materiais por parte da academia e da indústria. A filosofia desta conferência consiste em proporcionar um fórum internacional em que todos os participantes possam discutir os seus resultados e fazer novos contactos internacionais. Desde a realização do primeiro POLYCHAR, o objectivo geral tem sido a originalidade e qualidade dos trabalhos apresentados, privilegiando a globalização de participantes, os quais se pretende virem de todas as partes do globo. A conferência pretende ainda reunir debaixo do mesmo tecto investigadores de diferentes facetas desta área, incluindo os de investigação fundamental, simulação computacional e modelação, processamento, caracterização, entre outras.

A conferência incidirá nos seguintes temas, entre outros: métodos de previsão e simulações, relação estrutura-propriedades, superfícies, interfaces, adesão e tribologia, materiais de síntese, processamento e reologia, propriedades mecânicas e desempenho, propriedades eléctricas e dieléctricas, nanomateriais, materiais inteligentes, biomateriais, materiais verdes e materiais para a energia e reciclagem. Os trabalhos apresentados na conferência podem ser submetidos para publicação em números especiais das seguintes revistas: Polymer Engineering & Science, Macromolecular Symposia, Materials Research Innovations and Chemistry & Chemical Technology.

A conferência incluirá ainda um curso de um dia sobre Caracterização de Polímeros, o qual pretende fornecer informações básicas a estudantes e recém-chegados a esta área de investigação, bem com uma visão do estado da arte relativo a técnicas de caracterização. O curso é gratuito para

os participantes na conferência e será ministrado por investigadores de renome que estarão disponíveis para prestar esclarecimentos/troca de ideias durante a conferência.

E: polychar20@fkit.hr

URL: <http://www.polychar20-croatia.com/>



12TH EURASIA CONFERENCE ON CHEMICAL SCIENCES (EuAsC₂S)
16 - 21 ABRIL 2012 EM CORFU, GRÉCIA

Sob os auspícios da International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), a 12^a edição da Eurasia Conference on Chemical Sciences (EuAsC₂S) irá decorrer na ilha de Corfu, Grécia, entre os dias 16 e 21 de Abril de 2012, sendo organizada pela Universidade de Ioannina. De destacar o facto de que, pela primeira vez, esta conferência se realiza na Europa, uma vez que todas as edições anteriores foram realizadas em países Asiáticos, com a 1^a edição a decorrer em 1988 em Bangucoque, Tailândia. Durante a última década, diversos cientistas laureados com o Prémio Nobel da Química têm participado nesta conferência, contribuindo desta forma para o sucesso e excelência dos 11 eventos anteriores. Também a 12^a EuAsC₂S terá um programa científico recheado de personalidades ilustres, salientando-se a participação dos laureados com o Prémio Nobel Robert Huber (Alemanha), Jean-Marie Lehn (França), Akira Suzuki (Japão) e Ada Yonath (Israel). O programa científico encontra-se organizado em vários tópicos principais abrangendo as mais diversas áreas da química e inclui conferências plenárias, apresentações orais divididas em seis sessões paralelas, apresentações em poster e a realização de uma série de mini-simpósios. Os principais tópicos a serem abordados nas sessões incluem: Química inorgânica, Bioquímica clínica e diagnóstico molecular, Química farmacêutica e desenho de fármacos, Química verde e ambiental, Química-física e espectroscopia, Química computacional, Química organometálica e catálise, Polímeros inorgânicos, Química analítica e de soluções, Síntese orgânica e produtos naturais, Química alimentar, Química supramolecular e nanomateriais, Ciência de polímeros e Química educacional.

E: eurasia12@conf.uoi.gr

URL: <http://eurasia12.uoi.gr/>



2011

Centenário SPQ & Ano Internacional da Química



19TH INTERNATIONAL CONFERENCE ORGANIC SYNTHESIS
1 - 6 JULHO 2012 EM MELBOURNE, AUSTRÁLIA

Entre os dias 1 e 6 de Julho de 2012, Melbourne acolherá a realização da 19^a Conferência Internacional em Síntese Orgânica (ICOS19), a qual será realizada em simultâneo com a 24th Royal Australian Chemical Institute Organic Conference (RACIOrganic24), e conta com o apoio da IUPAC e do Instituto Real Australiano de Química (RACI). A conferência seguirá o programa tradicional de conferências ICOS anteriores, contando com diversas conferências plenárias proferidas por cientistas convidados, dos quais se destaca o laureado com o prémio Nobel da Química 2010, Ei-ichi Negishi (Universidade de Purdue, USA) e várias sessões paralelas. Terá ainda lugar uma palestra respeitante à entrega do prémio Thieme-IUPAC no valor de 5000€, o qual é atribuído a um cientista de idade inferior a 40 anos cuja investigação tenha tido um impacto relevante na Química de Síntese Orgânica.

A conferência integrará ainda a entrega de prémios Thieme-IUPAC para poster, especialmente destinados a estudantes. Como parte do programa da conferência RACIOrganic 24, haverá ainda a entrega de prémios para a melhor apresentação oral e em poster de estudantes, assim como a apresentação da medalha da Divisão de Química Orgânica, medalha A.J. Birch, a qual será entregue pela primeira vez.

Esta destacada conferência será indubitavelmente uma plataforma de discussão dos mais recentes avanços e descobertas na área da síntese orgânica. Entre os tópicos abordados neste evento, destacam-se os seguintes: Síntese total de produtos naturais, Novos reagentes e reacções, Catálise assimétrica, Perspectivas em química bioinorgânica e química biológica, Síntese de materiais orgânicos.

E: masr@unimelb.edu.au

URL: <http://www.icos19.com>

Secção compilada por **Joana Amaral**
(bquimica@ipb.pt) www.spq.pt

Janeiro/Fevereiro 2012 no Porto

9º Encontro Nacional da Divisão de Catálise e Materiais Porosos da SPQ (9ENCMP)
E: jlfaria@fe.up.pt

6-9 Janeiro 2012 em Doha, Qatar

14th International IUPAC Conference on Polymers and Organic Chemistry (POC 2012)
E: contact@poc2012.com
URL: <http://www.poc2012.com/>

9-11 Janeiro 2012 no Porto

7º Encontro Nacional de Cromatografia (ENC2012)
E: enc2012@fc.up.pt
URL: <http://www.spq.pt/eventos/enc2012/>

31 Janeiro-1 Fevereiro 2012 em Bruges, Bélgica

Second International Symposium on Hyphenated Techniques for Sample Preparation (HTSP-2)
E: htc@ordibo.be
URL: <http://www.ordibo.be/htc/>

1-3 Fevereiro 2012 em Bruges, Bélgica

International Symposium on Hyphenated Techniques in Chromatography and Hyphenated Chromatographic Analyzers (HTC-12)
E: htc@ordibo.be
URL: <http://www.ordibo.be/htc/>

12-15 Fevereiro 2012 no Dubai, Emirados Árabes Unidos

4th International Conference on Drug Discovery and Therapy
E: info@icddt.com
URL: <http://www.icddt4-03.com>

20-22 Fevereiro 2012 em Lyon, França

International Conferences on Microreaction Technology
E: contact@imret12.fr
URL: <http://www.imret12.fr/>

25-29 Março 2012 em San Diego, USA

243rd ACS National Meeting & Exposition
E: k_thompson@acs.org
URL: <http://portal.acs.org/portal/acs/corg/content>

26-30 Março 2012 em Dubrovnik, Croácia

20th International Conference on Polymer Characterization - World Forum on Advanced Materials
E: polychar20@fkit.hr
URL: <http://www.polychar20-croatia.com/>

31 Março-5 Abril 2012 em Lisboa

18th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements
E: SCTE2012@itn.pt
URL: <http://scte2012.itn.pt/>

2-3 Abril 2012 em Londres, Reino Unido

5th Annual Proteins Congress 2012
E: c.roberts@oxfordglobal.co.uk
URL: <http://www.proteins-congress.com/>

16-20 Abril 2012 em Graz, Áustria

11th World Filtration Congress (WFC11)
E: info@wfc11.at
URL: <http://www.wfc11.org/>

16-21 Abril 2012 em Corfu, Grécia

12th Eurasia Conference on Chemical Sciences
E: eurasia12@conf.uoi.gr
URL: <http://eurasia12.uoi.gr/>

23-24 Abril 2012 em Boston, USA

Flow Chemistry Congress
E: a.woodley@selectbiosciences.com
URL: <http://www.selectbiosciences.com/conferences/FCC2012/index.aspx>

9-11 Maio 2012 no Porto

3rd Portuguese Young Chemistry Meeting – 3PYChem
E: 3pychem@spq.pt

20-25 Maio 2012 em Quioto, Japão

10th International Conference on Heteroatom Chemistry
E: tokitoh@boc.kuicr.kyoto-u.ac.jp
URL: <http://oec.kuicr.kyoto-u.ac.jp/~ichac10/>

4-6 Junho 2012 em Toulouse, França

8th International Conference on Renewable Resources and Biorefineries
E: els@medicongress.com
URL: <http://www.rrbconference.com/>

17-20 Junho 2012 no Porto

7th European Meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications - SPEA7
E: spea7@spq.pt
URL: <http://www.spq.pt/eventos/spea7/>

18-22 Junho 2012 em Lisboa

International Symposium on Metal Complexes (ISMEC2012)
E: ismec2012@ist.utl.pt
URL: <http://ismec2012.ist.utl.pt/>

24-29 Junho 2012 em Blacksburg, USA

44th International Symposium on Macromolecules - IUPAC World Polymer Congress
E: telong@vtu.edu
URL: <http://www.macro2012.org>

1-6 Julho 2012 em Munique, Alemanha

15th International Congress on Catalysis
E: martz@dechema.de
URL: <http://events.dechema.de/en/icc2012.html>

1-6 Julho 2012 em Melbourne, Austrália

19th International Conference on Organic Synthesis
E: masr@unimelb.edu.au
URL: <http://www.icos19.com>

15-20 Julho 2012 em Coimbra

XXIV IUPAC Symposium on Photochemistry
E: burrows@ci.uc.pt
URL: <http://www.photoiupac2012.com/>

15-20 Julho 2012 em Roma, Itália

22nd International Conference on Chemistry Education - "Stimulating Reflection and Catalysing Change in Chemistry Education"
E: luigi.campanella@uniroma1.it
URL: <http://www.iccerice2012.org>

22-27 Julho 2012 em Madrid, Espanha

XVI International Carbohydrate Symposium
E: jjbarbero@cib.csic.es
URL: <http://www.ics2012madrid.com/index.html>

5-11 Agosto 2012 em Celtic Manor, País de Gales

EUChem Conference Molten Salts and Ionic Liquids
E: euchem2012@qub.ac.uk
URL: <http://www.euchem2012.org/>

26-30 Agosto 2012 em Praga, República Checa

4th EuCheMS Chemistry Congress
E: info@euchems-prague2012.cz
URL: <http://www.euchems-prague2012.cz/>

16-19 Setembro 2012 em Bragança

11º Encontro de Química dos Alimentos (11ºEQA)
E: eqa11@ipb.pt

25-28 Setembro 2012 em Aveiro

IV Ibero-American NMR Meeting/VI GERMN Bient Meeting/III Iberian NMR Meeting
URL: <http://http://www.spq.pt/eventos/iberoanmr2012/>